# Agilent MassHunter ワークステーション ソフトウェア

## 定性分析

# ファミリアリゼーション ガイド

Agilent Technologies

# 注意

© Agilent Technologies, Inc. 2011

このマニュアルの内容は米国著作権法および国際著作権法によって保護されており、Agilent Technologies, Inc. の書面による事前の許可なく、このマニュアルの一部または全部をいかなる形態（電子データやデータの抽出または他国語への翻訳など）あるいはいかなる方法によっても複製することが禁止されています。

## マニュアル番号

G3336-96007

## エディション

リビジョン B、2011 年 2 月

Printed in USA

Agilent Technologies, Inc.
5301 Stevens Creek Blvd.
Santa Clara, CA 95051 USA

Microsoft ®、Windows 7®、および Excel® は、米国およびその他の国における Microsoft Corporation の米国の登録商標です。

## ソフトウェアリビジョン

このガイドは、改訂されるまで Agilent MassHunter ワークステーション ソフトウェア – 定性分析 プログラムの B0.04.00 以降のリビジョンに対応しています。

## 保証

**このマニュアルの内容は「現状のまま」提供されることを前提としており、将来の改訂版で予告なく変更されることがあります。また、Agilent は適用される法律によって最大限許される範囲において、このマニュアルおよびそれに含まれる情報に関し、商品の適格性や特定用途に対する適合性への暗黙の保障を含み、また、それに限定されないすべての保証を明示的か暗黙的かを問わず、一切いたしません。Agilent は、このマニュアルまたはこのマニュアルに記載されている情報の提供、使用または実行に関連して生じた過誤、付随的損害あるいは間接的損害に対する責任を一切負いません。Agilent とお客様の間に書面による別の契約があり、このマニュアルの内容に対する保証条項がここに記載されている条件と矛盾する場合は、別に合意された契約の保証条項が適用されます。**

## 技術ライセンス

本書で扱っているハードウェアおよびソフトウェアは、ライセンスに基づき提供されており、それらのライセンス条項に従う場合のみ使用または複製することができます。

## 制限付き権利に関する説明

アメリカ合衆国政府制限付き権利。連邦政府に付与されるソフトウェアおよび技術データの権利は、慣例法によりエンドユーザーに提供される権利だけが含まれます。Agilent は、FAR 12.211（技術データ）および12.212（コンピュータソフトウェア）、国防総省に対しては DFARS 252.227-7015（技術データ – 市販品）および DFARS 227.7202-3（市販コンピュータまたはコンピュータソフトウェア付属文書の権利）に準拠して、ソフトウェアの市販ライセンスと技術データを提供します。

## 安全にご使用いただくために

**注意**

**注意**は、取り扱い上、危険があることを示します。正しく実行しなかったり、指示を遵守しないと、製品の破損や重要なデータの損失にいたるおそれのある操作手順や行為に対する注意を促すマークです。指示された条件を十分に理解し、条件が満たされるまで、**注意**を無視して先に進んではなりません。

**警告**

**警告は、取り扱い上、危険があることを示します。正しく実行しなかったり、指示を遵守しないと、人身への傷害または死亡にいたるおそれのある操作手順や行為に対する注意を促すマークです。指示された条件を十分に理解し、条件が満たされるまで、警告を無視して先に進んではなりません。**

# このガイドでは…

このガイドには、Agilent MassHunter ワークステーション ソフトウェア – 定性分析 の使い方を学習するための情報が含まれています。

実習を始める前に、7 ページの「実習を開始する前に」の説明を読んでください。

定性分析プログラムのリビジョン B.04.00 および B.03.01 は、同じ PC にインストールすることができます。このファミリアリゼーションガイドは、リビジョン B.04.00 用に作成されています。

## 実習 1　定性分析の基礎の学習

この実習では、定性分析プログラムの多くの機能の一部を学習します。使用するデータタイプに関わらず、これらのタスクは重要です。

## 実習 2　化合物の検出と同定

最初の 2 つのタスクでは、複雑なマトリックス中の低濃度サルファ剤を検出および同定し、TOF と Q-TOF の両データに対して化学式を作成します。TOF と Q-TOF の両データを用いた、タンパク質消化物の Molecular Feature Extraction も行います。トリプル四重極データでも、これらのタスクを実行できます。

## 実習 3　ワークフローを使用した定性分析メソッドの設定と実行

これらのタスクでは、定性分析メソッドの設定および実行方法を学習します。また、解析や化合物同定を自動化するためのメソッド編集も学習します。その後、データファイルを開くときに、メソッドから自動的に処理を実行します。そして、ワークリストを用いて自動化を実行するメソッドの作成も学習します。各タスクは異なるワークフローを使用して行います。

## 実習 4　定性分析のウィザード

定性分析プログラムには複数のウィザードがあります。これらのウィザードは、特定タスクの実行に必要な一連のステップをガイドします。

［クロマトグラムピークの同定］ウィザード - このウィザードは、［クロマトグラムピーク調査（解析レポートなし）］処理の実行前に変更するメソッドエディタのさまざまなセクションとタブをガイドします。

［ターゲットの検出：**MFE +** データベース検索］ウィザード - このウィザードは、［**Molecular Feature** による検出］アルゴリズムおよび［データベース検索］アルゴリズムの実行前に変更するメソッドエディタのさまざまなセクションとタブをガイドします。

## リファレンス

この章では、定性分析プログラムに関する基本の一部を学習します。

# 最新情報

## B.04.00（定性分析）

- 定性分析プログラムは OS として Windows 7 をサポートします。
- Windows 7 では Excel 2010 をサポートします。
- テキストとグラフィックの注釈をクロマトグラムおよびスペクトルに追加できます。
- ［MS スペクトル結果］および［UV スペクトル結果］ウィンドウで、スペクトルに質量差を追加できます。
- デコンボリュートスペクトルには、アミノ酸の質量差と修飾の質量差を追加できます。
- MRM データファイルの情報を使用して、化合物の検出を実行できます。 定性分析プログラムは、データ測定メソッドから MRM トランジションの化合物名を取得します。
- LC/MS および GC/MS データについては、SN 比計算のノイズ範囲を自動的に選択するように設定できます。
- ［自動 -RMS］アルゴリズムを SN 比の計算に使用できます。
- ［化合物リスト］ウィンドウが更新され、化合物の情報が表示されるようになりました。
- 化合物の同定結果は、［化合物同定結果］ウィンドウに統合して表示されます。
- 特定のテクニックによって同定された化合物のみを表示するように、同定テクニックで同定結果をフィルタすることができます。
- スペクトルの同定結果は、［スペクトル同定結果］ウィンドウに統合して表示されます。
- スペクトルまたは化合物に、マニュアルで同定情報を追加できます。同定結果を消去することにより、マニュアル同定情報も消去できます。
- ［Molecular Feature による検出］アルゴリズムの実行時に、自動的に MS/MS スペクトルを抽出できます。各コリジョンエネルギーごとに個別の MS/MS スペクトルを抽出するか、すべてのコリジョンエネルギーに対して 1 つのスペクトルを抽出するかを選択できます。タンパク質アプリケーションではスペクトルの同位体を考慮しない選択もできます。
- クロマトグラムからクロマトグラムを減算できます。

- デコンボリュートスペクトルを減算できます。
- グリカン構造を表示できます。
- 化学データディクショナリに修飾および架橋のサマリーを表示できます。
- ワークフローごとに異なる、変更が必要なさまざまなパラメータを表示する複数のウィザードが追加されました。
- すべてのクロマトグラムで、Agile 積分をサポートします。
- MS、MS/MS、UV、GC クロマトグラムの積分時に、システム適合性計算を実行できます。
- ［Molecular Feature による検出］アルゴリズムでピークフィルタを指定できます。
- ［クロマトグラムデコンボリューションによる検索］アルゴリズムで質量フィルタを指定できます。
- ［精密質量ライブラリの検索］アルゴリズムで最小 Forward 検索スコアおよび最小 Reverse 検索スコアを指定できます。
- MassHunter 測定プログラムに読み込ませることのできる MS/MS 取り込みリストをエクスポートできます。
- さまざまなフォーマットへのデータのエクスポートが、より簡単に実行できます。
- ［化合物リスト］ウィンドウおよび［化合物同定結果］テーブルの列をフィルタできます。
- 新しいワークフローに切り替える際に、より詳細なオプション（現在のメソッドを保存するかどうか、現在のメソッドを再読み込みするかどうか、現在のレイアウトを使用するかどうかなど）を設定できます。
- MGF または mzData ファイルのエクスポート時は、グリカン同位体モデルをサポートします。
- 同位体分布 計算ツールプログラム（Isotope Distribution Calculator）が含まれます。
- BioConfirm をインストールすると、単一リファレンスデータファイルと 1 つ以上のサンプルデータファイルの［シーケンスの照らし合わせ］比較に MassHunter 比較解析プログラムが使用できます。リファレンスデータファイルは、一度に 1 つのサンプルデータファイルとのみ比較できます。

- BioConfirm をインストールすると、[シーケンスの定義と照らし合わせ] アルゴリズムの [スコア] パラメータを指定できます。
- BioConfirm をインストールすると、最大エントロピーによる化合物の検出ができます。
- BioConfirm をインストールすると、MS/MS による確認を実行できます。

# 実習を開始する前に

- ソフトウェアをインストールします。説明については、『インストールガイド』を参照してください。
- インストールディスクから **Data** という名前のフォルダを、非圧縮形式でご使用のハードディスクの任意の場所にコピーします。

  このフォルダには、実習に必要なデータファイルすべてが含まれています。まず、.zip フォーマットからデータファイルを展開する必要がある場合もあります。

**注記**

システムにある既存の実習用データファイルの使用は避けてください。ディスク上のオリジナルからコピーされており、自分以外には使用しておらず、変更されていないデータの場合のみ既存データを使用できます。システムに既にある実習用データファイルがディスク上のオリジナルファイルから変更されており同一でない場合は、実習中に得られる結果がこのガイドで示される結果と一致しなくなります。

# 目次

**実習 1　定性分析の基礎の学習　13**

すべてのデータの基本タスク　16

タスク 1. 定性分析プログラムを開く　16

タスク 2. クロマトグラムの拡大 / 縮小　19

タスク 3. クロマトグラムの固定　21

タスク 4. ウィンドウレイアウトの変更　22

タスク 5. 解析レポートの印刷　24

タスク 6. 注釈の追加　26

MS のみのデータのタスク（TOF、Q-TOF、トリプル四重極）　28

タスク 7. クロマトグラムの抽出（MS のみ）　28

タスク 8. クロマトグラムの積分（MS のみ）　30

タスク 9. クロマトグラムからのスペクトルの抽出（MS のみ）　33

タスク 10. 質量差の追加　40

LC/MS/MS データのタスク（Q-TOF とトリプル四重極）　42

タスク 11. クロマトグラムの抽出（LC/MS と LC/MS/MS）　42

タスク 12. クロマトグラムの積分（LC/MS と LC/MS/MS）　44

タスク 13. クロマトグラムからのスペクトルの抽出（LC/MS と LC/MS/MS）　49

MS データと UV データのタスク　60

タスク 14. クロマトグラムの抽出（MS と UV）　60

タスク 15. クロマトグラムの積分（UV）とシステム適合性値の計算（MS と UV）　62

タスク 16. クロマトグラムからのスペクトルの抽出（UV）　65

GC-MS データのタスク　69

タスク 17. GC のユーザーインターフェイスのコンフィグレーション　69

タスク 18. GC/MS データファイルからのクロマトグラムの抽出　71

タスク 19. GC/MS クロマトグラムの積分 75
タスク 20. GC/MS データファイルの基本タスク 80

実習 2 化合物の検出と同定 89

MS データのタスク（LC/MS - TOF、Q-TOF、トリプル四重極） 91
タスク 1. Molecular Feature による化合物の検出（LC/MS - MS のみ） 91
タスク 2. 化学式の作成と化合物の同定（LC/MS - MS のみ） 96
タスク 3. 化合物レポートの印刷（LC/MS - MS のみ） 99
タスク 4. 化学式による化合物の検出とサンプル純度の計算（LC/MS - MS のみ） 101
タスク 5. タンパク質消化物の Molecular Feature Extraction の実行（LC/MS - MS のみ） 105

MS/MS データのタスク（LC/MS - Q-TOF、トリプル四重極） 108
タスク 1. 化合物の検出（LC/MS - MS と MS/MS） 108
タスク 2. 化合物の同定と化学式の推定（LC/MS - MS と MS/MS） 111
タスク 3. 化合物レポートの印刷（LC/MS - MS/MS） 114
タスク 4. 化合物の検出と精密質量ライブラリの検索（LC/MS - MS/MS） 116
タスク 5. タンパク質消化物の Molecular Feature Extraction の実行（LC/MS - MS と MS/MS） 119

GC-MS データのタスク（トリプル四重極） 121
タスク 1. クロマトグラムデコンボリューションによる化合物の検出（GC/MS） 121
タスク 2. ライブラリ検索アルゴリズムによる化合物の同定（GC/MS） 124
タスク 3. MRM による化合物の検出（GC/MS - MRM のみ） 126

実習 3 ワークフローを使用した定性分析メソッドの設定と実行 129

タスク 1. 一般ワークフローの定性分析メソッドの設定と実行 130
タスク 2. クロマトグラムピーク調査ワークフローの自動解析メソッドの設定と実行 136
タスク 3. MS ターゲット化合物のスクリーニングワークフローで化合物同定を自動化するメソッドの設定と実行 142
タスク 4. ワークリストで実行する定性メソッドの設定 147

**実習 4　定性分析のウィザード　151**

タスク 1.［クロマトグラムピークの同定］ウィザードの実行　152

タスク 2.［ターゲットの検出 : MFE + データベース検索］ウィザードの実行　159

**リファレンス　163**

ウィンドウの操作　164

データナビゲータ における結果データの操作　166

クロマトグラムの操作を行う　167

MS または MS/MS スペクトルで操作を行う　168

クロマトグラフ表示データの操作　169

スペクトル表示データの操作　170

ワークフロー　171

レポートテンプレートのカスタマイズ　174

# 実習 1
# 定性分析の基礎の学習

すべてのデータの基本タスク 16
タスク 1. 定性分析プログラムを開く 16
タスク 2. クロマトグラムの拡大 / 縮小 19
タスク 3. クロマトグラムの固定 21
タスク 4. ウィンドウレイアウトの変更 22
タスク 5. 解析レポートの印刷 24
タスク 6. 注釈の追加 26
MS のみのデータのタスク（TOF、Q-TOF、トリプル四重極） 28
タスク 7. クロマトグラムの抽出（MS のみ） 28
タスク 8. クロマトグラムの積分（MS のみ） 30
タスク 9. クロマトグラムからのスペクトルの抽出（MS のみ） 33
タスク 10. 質量差の追加 40
LC/MS/MS データのタスク（Q-TOF とトリプル四重極） 42
タスク 11. クロマトグラムの抽出（LC/MS と LC/MS/MS） 42
タスク 12. クロマトグラムの積分（LC/MS と LC/MS/MS） 44
タスク 13. クロマトグラムからのスペクトルの抽出（LC/MS と LC/MS/MS） 49
MS データと UV データのタスク 60
タスク 14. クロマトグラムの抽出（MS と UV） 60
タスク 15. クロマトグラムの積分（UV）とシステム適合性値の計算（MS と UV） 62
タスク 16. クロマトグラムからのスペクトルの抽出（UV） 65
GC-MS データのタスク 69
タスク 17. GC のユーザーインターフェイスのコンフィグレーション 69
タスク 18. GC/MS データファイルからのクロマトグラムの抽出 71
タスク 19. GC/MS クロマトグラムの積分 75
タスク 20. GC/MS データファイルの基本タスク 80

この実習では、TOF、Q-TOF、トリプル四重極データを用いて作業するための定性分析プログラムの多くの機能の一部を学習します。

まず、データタイプに左右されないタスクを実行します。

- タスク 1 では、複数のデータファイルを用いてプログラムを開きます。
- タスク 2 では、データの特定のポイントを拡大 / 縮小します。
- タスク 3 では、スクロールの際にクロマトグラムがビューから見えなくならないよう、クロマトグラムを固定します。
- タスク 4 では、ウィンドウのレイアウトを変更します。
- タスク 5 では、解析レポートを印刷します。
- タスク 6 では、テキスト注釈をクロマトグラムに追加します。

次に、MS のみのデータを用いて作業するか、MS と MS/MS を組み合わせたデータ、MS と UV を組み合わせたデータ、または GC/MS データを用いて作業するかを選択します。

## 以下のタスクでは、MS のみのデータを用いて作業します。

- タスク 7. クロマトグラムの抽出（MS のみ）では、さまざまな濃度でクロマトグラムを抽出し、EIC をマージします。
- タスク 8. クロマトグラムの積分（MS のみ）では、クロマトグラムを積分し、積分パラメータを変更し、積分したピークの S/N 比を計算します。
- タスク 9. クロマトグラムからのスペクトルの抽出（MS のみ）では、クロマトグラムの特定のポイントや範囲からスペクトルを抽出し、それらの平均化やバックグラウンドデータ減算を学習します。
- タスク 10. 質量差の追加では、抽出されたピークスペクトルに質量差を追加します。これらの手順により質量差を MS スペクトルまたは MS/MS スペクトルに追加することができます。

## 以下のタスクでは、MS と MS/MS を組み合わせたデータを用いて作業します。

- タスク 11. クロマトグラムの抽出（LC/MS と LC/MS/MS）
- タスク 12. クロマトグラムの積分（LC/MS と LC/MS/MS）
- タスク 13. クロマトグラムからのスペクトルの抽出（LC/MS と LC/MS/MS）

## 以下のタスクでは、MS と UV を組み合わせたデータを用いて作業します。

- タスク 14. クロマトグラムの抽出（MS と UV）

- タスク 15. クロマトグラムの積分（UV）とシステム適合性値の計算（MS と UV）
- タスク 16. クロマトグラムからのスペクトルの抽出（UV）

### 以下のタスクでは、GC/MS または GC/MS/MS のデータを用いて作業します。

- タスク 17. GC のユーザーインターフェイスのコンフィグレーション
- タスク 18. GC/MS データファイルからのクロマトグラムの抽出
- タスク 19. GC/MS クロマトグラムの積分
- タスク 20. GC/MS データファイルの基本タスク

実習方法を示す表は、以下の 3 列に分けて表示されています。

- ステップ - 操作概要です。各自でプログラムを実行します。
- 詳細説明 - ステップの実行に必要な手順を示しています。
- コメント - 実習の各ステップに関するヒントや追加情報を記しています。

# すべてのデータの基本タスク

## タスク 1. 定性分析プログラムを開く

このタスクでは、現在のメソッドを用いて複数のデータファイルを開きます。

タスク 1. 複数のデータファイルを用いて定性分析プログラムを開く

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
| --- | --- | --- |
| **1** 定性分析プログラムを開きます。<br>• フォルダ **MassHunter\Data**、またはデータファイルをコピーしたフォルダから **sulfas-PosAutoMSMS**、**sulfas-PosMS.d**、**sulfas-PosTargetedMSMS.d** データファイルを開きます。 | **a** **Agilent MassHunter** の［**Qualitative Analysis B.04.00**］アイコン をダブルクリックします。<br>［データファイルを開く］ダイアログボックスが表示されます。<br>**b** フォルダ **MassHunter\Data\LC** またはデモファイルを置いたフォルダに移動します。 | • sulfas-PosMS.d ファイルには、MS（TOF または Q-TOF）データが、sulfas-PosAutoMSMS.d と sulfas-PosTargetedMSMS.d ファイルには MS と MS/MS（Q-TOF）の両方のデータが含まれます。<br>• ウィンドウがアクティブの時に `F1` キーを押すと、ウィンドウ、ダイアログボックス、タブに関するヘルプが表示できます。 |

• ［**現在のメソッドを使用**］ボタンが選択されていることを確認します。
• ［**選択したメソッドでファイルを開くときにする処理を実行**］チェックボックスがオフになっていることを確認します。
• ［**結果データの読み込み**］チェックボックスがオフになっていることを確認します。

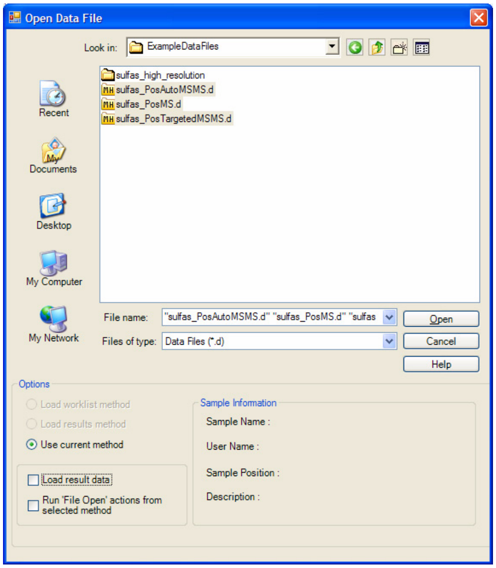



**図 1** ソフトウェアを開く際にデータファイルを開く

タスク 1. 複数のデータファイルを用いて定性分析プログラムを開く （続き）

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|
| | **c** 〈**Shift**〉キーを押したまま、**sulfas_PosAutoMSMS**、**sulfas_PosMS.d**、**sulfas-PosTargetedMSMS.d** をクリックします。<br>**d** ［**開く**］をクリックします。<br>3 つのデータファイルすべてが［データナビゲータ］ウィンドウに表示され、1 ～ 3 のクロマトグラムが［クロマトグラム結果］ウィンドウに表示されます。<br>**e** ［クロマトグラム結果］ツールバーの［リストモード］アイコン をクリックします。 | • 〈Shift〉キーの代わりに〈**Ctrl**〉キーを押すと、連続していない複数のファイルをリストから選択できます。<br>• この時点でメインウィンドウに表示される内容は、これらのファイルを開く前に使用されたメソッド、レイアウト、表示、プロット設定によって異なります。 |

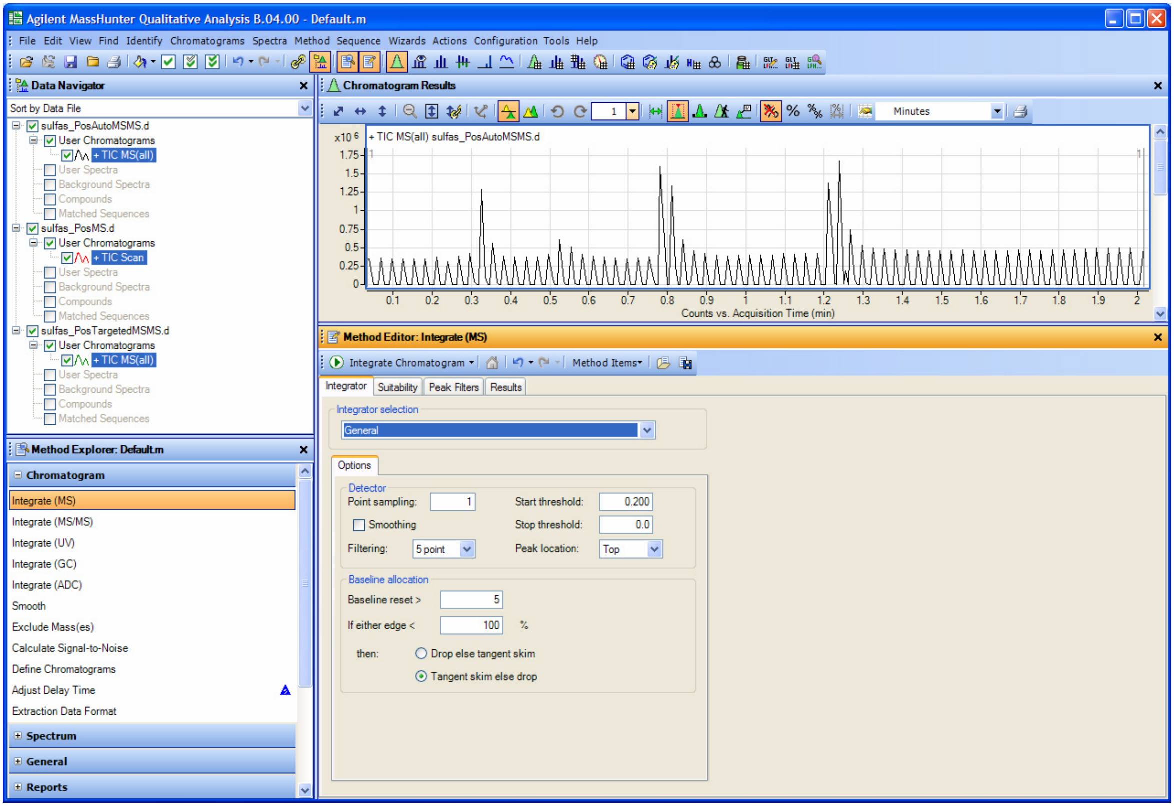



**図 2**　定性分析メインウィンドウ

タスク 1. 複数のデータファイルを用いて定性分析プログラムを開く （続き）

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|
| **2** メインウィンドウをデフォルトワークフローの［一般］に戻します。デフォルトのメソッドとレイアウトが読み込まれます。<br>• 3つのクロマトグラムすべてが見えることを確認します。 | **a** 必要に応じて［**コンフィグレーション**］>［**ワークフローのコンフィグレーション**］>［**一般**］をクリックします。<br>**b**［ワークフロー コンフィグレーション］ダイアログボックスで［**ワークフローのデフォルトメソッドを読み込む**］ボタンと［**ワークフローのデフォルトレイアウトを読み込む**］ボタンをクリックします。［**現在のメソッドを保存する**］チェックボックスをオフにします。［**OK**］ボタンをクリックします。<br>**c**［クロマトグラム結果］ツールバーの［リストペインの最大数］アイコン隣の下矢印をクリックし、**3** を選択します。 | •［一般］ワークフローに切り替えた後でも、表示とプロット設定は同じままです。表示とプロットの設定は、各データタイプの［表示オプション］ダイアログボックスから指定します。表示オプションを変更するには、グラフィックウィンドウの ボタンをクリックします。<br>•［**コンフィグレーション**］>［**ウィンドウレイアウト**］>［**レイアウトの読み込み**］をクリックして、レイアウトを変更することができます。 |

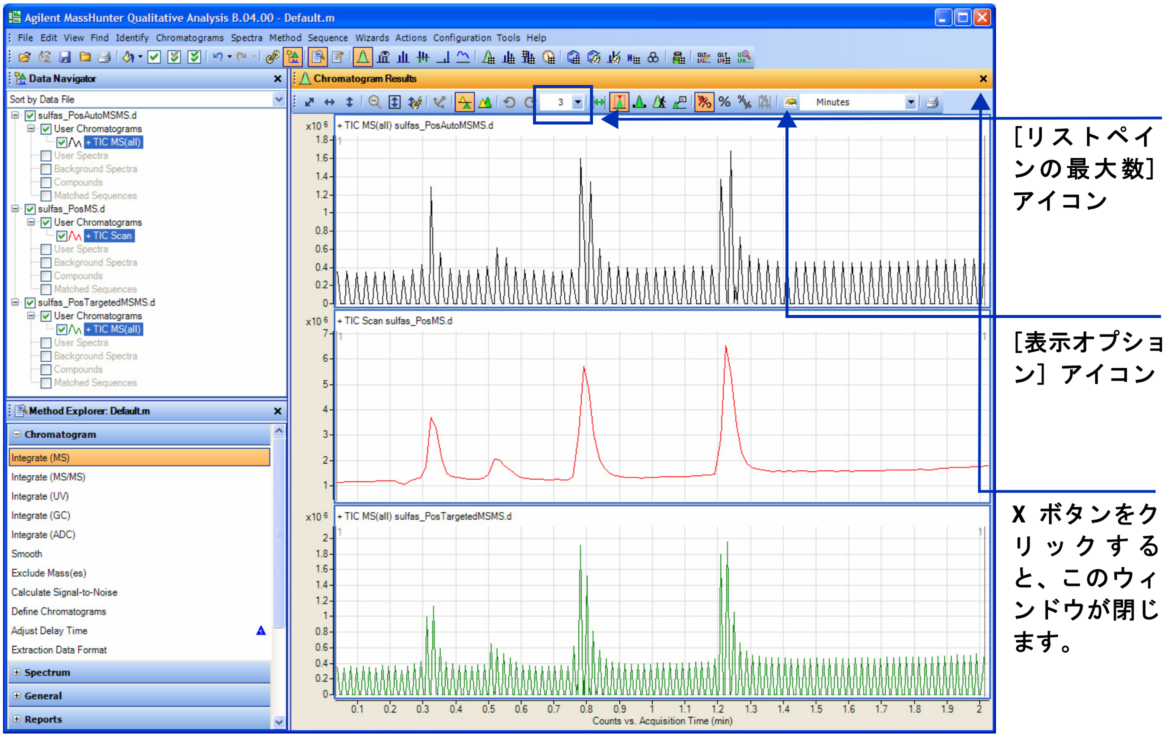



**図 3**　一般ワークフローが選択されている場合の定性分析メインウィンドウ

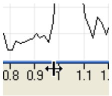
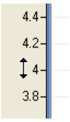
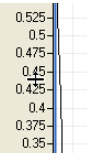
# タスク 2. クロマトグラムの拡大 / 縮小

このタスクでは、定性分析プログラムの拡大 / 縮小機能について学習します。

タスク 2. クロマトグラムの拡大 / 縮小

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|
| **1** 3 つのクロマトグラムのうち 1 つのみを拡大 / 縮小します (X 軸と Y 軸両方)。<br>• その他を非表示にします。<br>• 最後のピークを 2 回拡大します。<br>• Y 軸をオートスケールでもう 1 回拡大します。<br>• 1 回縮小して、前の倍率に戻します。<br>• 元のクロマトグラムに完全に戻します。 | **a** 非表示にするクロマトグラムのチェックボックスを ［データナビゲータ］ ウィンドウでオフにします。<br>**b** 最後のピークの領域を右クリックし、ドラッグします。<br>この段階で **［ズーム中に Y 軸をオートスケール］** アイコン が選択されていないことを確認します。<br>**c** ステップ b を繰り返します。<br>**d** ツールバーの **［ズーム中に Y 軸をオートスケール］** アイコン をクリックします。<br>**e** 3 回目として最後のピークの領域を右クリックし、ドラッグします。<br>定性分析プログラムにより、範囲の最大ポイントに合わせて、Y 軸が自動的に拡大されます。<br>**f** **［ズーム解除］** アイコン をクリックし、最後のズーム操作を取り消します。<br>過去15回のズーム操作を取り消すことができます。<br>**g** **［X 軸と Y 軸のオートスケール］** アイコン をクリックし、完全にズームを解除します。 | • ［データナビゲータ］ ウィンドウでその行がチェックされていない場合、その行の情報は定性分析プログラムのすべてのウィンドウで表示されません。［データナビゲータ］ ウィンドウでその情報のチェックボックスをオンにすると、情報は他のウィンドウでも再度表示されるようになります。<br>• ［スペクトルプレビュー］ ウィンドウ、［MS スペクトル結果］ ウィンドウ、［デコンボリューション結果］ ウィンドウ、［UV 結果］ ウィンドウ、および ［結果の差］ ウィンドウのスペクトルにもこれらのズーム機能を使用できます。<br>• 選択したアイコンの背景色はオレンジ色です。 |

タスク 2. クロマトグラムの拡大 / 縮小 （続き）

| ステップ | 詳細説明 | コメント | |
|---|---|---|---|
| **2** 別々に拡大 / 縮小を実習します。<br>• X 軸に沿ってのみ拡大します。<br>ヒント：X 軸の値を右クリックし、カーソルを左から右に移動させます。<br>• X 軸を部分的に縮小します。<br>ヒント：反対方向にカーソルを移動させます。<br>• X 軸のズームを完全に解除します。<br>• Y軸に対して同じステップを繰り返します。 | **a** X 軸を拡大するには、水平の二重矢印が表示されるまで X 軸値にカーソルを移動させます。<br>**b** X 軸値を右クリックし、新しいカーソルを X 軸全域で左から右にドラッグします。<br>**c** X 軸を縮小するには、X 軸値を右クリックし、左から右にドラッグします。<br>**d** **[X 軸のオートスケール]** アイコン をクリックし、X 軸のズームを完全に解除します。<br>**e** Y 軸を拡大するには、垂直の二重矢印が表示されるまで Y 軸値にカーソルを移動させます。<br>**f** Y 軸の値を右クリックし、新しいカーソルを Y 軸全域で下から上にドラッグします。<br>**g** Y 軸を縮小するには、Y 軸値を右クリックし、上から下に向かってドラッグします。<br>**h** **[Y 軸のオートスケール]** アイコン をクリックし、Y 軸のズームを完全に解除します。 | <br><br><br> | **水平二重矢印**<br>**X 軸値を右クリックすると新しいカーソルが表示されます。**<br>**垂直二重矢印**<br>**Y 軸値を右クリックすると新しいカーソルが表示されます。** |

# タスク 3. クロマトグラムの固定

このタスクでは、クロマトグラムを固定します。クロマトグラムを固定すると、他のクロマトグラムを表示するためにスクロールしても、固定されたクロマトグラムは常に表示されたままとなります。

タスク 3. クロマトグラムの固定

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|
| • クロマトグラムを固定します。<br>　• 3つのクロマトグラムすべてを表示します。<br>　• クロマトグラム表示リストを1に設定していることを確認します。<br>　• ［クロマトグラム結果］ウィンドウで、2 番目の TIC を選択します。<br>　• この TIC を固定します。<br>　• クロマトグラム全域をスクロールします。<br>　• 固定を解除します。 | **a** ［データナビゲータ］で、前のタスクで非表示にしたクロマトグラムのチェックボックスをオンにします。<br>**b** ［クロマトグラム結果］ウィンドウで、ペインの最大数が 1 に設定されていることを確認します。<br>**c** ［クロマトグラム結果］ウィンドウで、2 番目の TIC を選択します。<br>**d** クロマトグラム内を右クリックし **［固定する］**をクリックします。<br>**e** ［クロマトグラム結果］ウィンドウのスクロールバーを用いて、クロマトグラムのリスト全体をスクロールします。2 番目の TIC は常に表示されます。<br>**f** **［クロマトグラム］>［固定を解除］**をクリックします。 | • クロマトグラムを固定すると、［データナビゲータ］の固定されているクロマトグラム名の隣に固定アイコンが表示されます。<br>• 表示リストが 1 の場合でもクロマトグラムを 1 つ固定した後は［クロマトグラム結果］ウィンドウに 2 つのクロマトグラムが表示されます。これは、固定したクロマトグラムに加えて、1 つのクロマトグラムを表示することを意味しています。<br>• クロマトグラムを右クリックし、ショートカットメニューの **［固定を解除］**をクリックすることもできます。 |

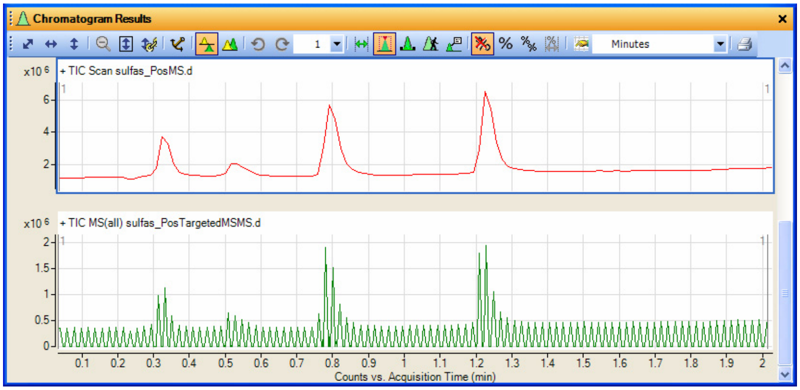



**図 4**　［クロマトグラム結果］ウィンドウでの固定した TIC

# タスク 4. ウィンドウレイアウトの変更

このタスクでは、メインビューにウィンドウを移動させ、さまざまなウィンドウレイアウトを作成します。

タスク 4. ウィンドウレイアウトの変更

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|
| **1** 以下の、ウィンドウレイアウトを変更します。<br>• ウィンドウサイズの変更。<br>• ウィンドウレイアウトの保存。<br>• レイアウトのロック解除。<br>• [クロマトグラム結果] ウィンドウをフローティングに変更。<br>• [クロマトグラム結果] ウィンドウの移動。<br>• ウィンドウ位置変更用ツールの表示。 | • ウィンドウのサイズを変更するには、ウィンドウ間の境界線をドラッグします。<br>• ウィンドウレイアウトを保存するには [**コンフィグレーション**] > [**ウィンドウレイアウト**] > [**レイアウトの保存**] をクリックします。<br>• レイアウトのロックを解除するには、[**コンフィグレーション**] > [**ウィンドウレイアウト**] > [**レイアウトのロック**] をクリックします。<br>• ウィンドウをフローティング表示するには、ウィンドウのタイトルバーを右クリックし、ショートカットメニューから [**Floating**] をクリックします。<br>• ウィンドウを移動するには、ウィンドウのタイトルバーをクリックし、移動したい位置にウィンドウをドラッグします。<br>• 位置変更ツールを表示するには、ウィンドウを他のウィンドウの上にドラッグします。ウィンドウを別のウィンドウに重ねると、図 5 のように、プログラムにはいくつかのレイアウトツールが表示されます。 | • レイアウトのロックを解除すると [レイアウトのロック] メニュー横のチェックマークは消えます。<br>• 位置変更ツールは、レイアウトのロックが解除されている場合に限り使用できます。<br>• ウィンドウのタイトルバーをダブルクリックすることでも、ウィンドウをフローティングに設定できます。<br>• ソフトウェアには、事前に作成されたさまざまなレイアウトが用意されています。それとは異なるレイアウトを読み込むこともできます。<br>• ソフトウェアには複数の異なるワークフローがあります。各ワークフローは異なるレイアウトを読み込みます。異なるワークフローに切り替えると、レイアウトも変更されます。<br>• BioConfirm プログラムがインストールされている場合、さらにいくつかの追加ワークフローとレイアウトを使用できます。 |

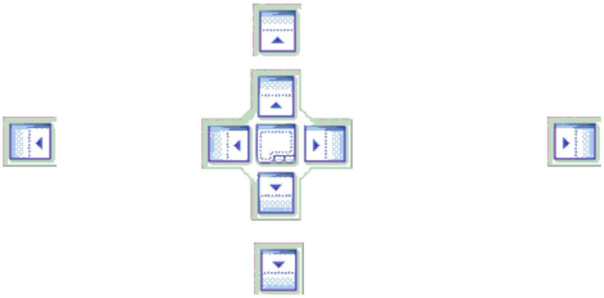


**図 5** ウィンドウ位置変更ツール

タスク 4. ウィンドウレイアウトの変更 （続き）

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
| --- | --- | --- |
| **2** ［クロマトグラム結果］ウィンドウの位置を変えます。<br>• ウィンドウを他のウィンドウの上、左、右、下になるように移動させます。<br>• 2つのウィンドウが上下に重なるように移動させ、下のウィンドウのタブによってのみ使用できるようにします。<br>• デフォルトレイアウトを復元します。 | • 小さなアイコンのいずれかの上にカーソルをドラッグすると、ドラッグしているウィンドウは他のすべてのウィンドウの上、右、下、または左に置かれます。<br>• 大きなアイコンの上にカーソルをドラッグします。大きなアイコンの端の上にカーソルをドラッグすることでも、他のウィンドウの上、右、下、左にウィンドウを置くことができます。<br>• 2 つのウィンドウを一緒にタブ付けするには、大きなアイコンの中心にカーソルをドラッグします。一緒にタブ付けされた 2 つのウィンドウには影が付けられます。マウスのドラッグを止めます。2 つのウィンドウが一緒にタブ付けされます。<br>• **［コンフィグレーション］ > ［ウィンドウレイアウト］ > ［デフォルトレイアウトの復元］**をクリックします。 | • 位置を変更するには、ボックス内の矢印の 1 つの上にカーソルを置く必要があります。<br>• **［デフォルトレイアウトの復元］**コマンドをクリックすると、一般ワークフローで使用されるレイアウトが復元します。異なるワークフローを使用している場合、そのワークフローで使用されるレイアウトを読み込む必要があります。 |

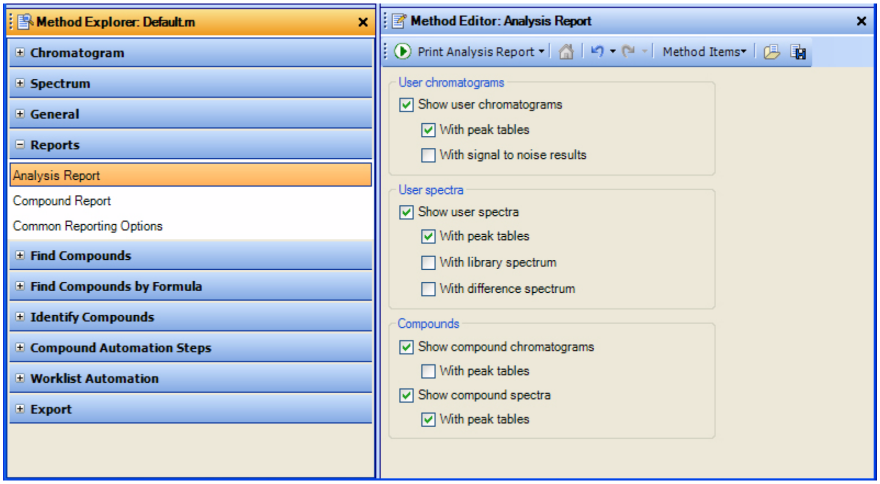
# タスク 5. 解析レポートの印刷

この実習または次の実習のタスクを実行した後に解析レポートを印刷する際には、この説明を参照してください。

解析レポートには、クロマトグラムの抽出や積分、スペクトルの抽出、化合物の検出、ピークスペクトルに関するデータベースの検索、またはピークスペクトルからの化学式の作成の結果を含めることができます。

タスク 5. 解析レポートの印刷

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
| --- | --- | --- |
| **1** 解析レポートの選択を変更します。<br>• 印刷するクロマトグラム、スペクトル、またはテーブルのチェックボックスをオンにします。<br>• 印刷しないクロマトグラム、スペクトル、またはテーブルのチェックボックスの選択を解除します。 | **a** ［メソッドエクスプローラ］ウィンドウで［**レポート**］>［**解析レポート**］をクリックします。<br>**b** 印刷する追加選択項目のチェックボックスをオンにします。<br>**c** 印刷しないクロマトグラムとスペクトルの選択を解除します。 | • 解析レポートには、このセクションで選択した情報のみが含まれます。<br>• このセクションで選択されている場合でも、結果データでその情報が得られないときは、その結果はレポートに含まれません。たとえば、クロマトグラムを積分していない場合、積分ピークテーブルはレポートに含まれません。 |




デフォルトでは、［メソッドエディタ］ウィンドウはフローティングです。定性分析プログラムのメインウィンドウから独立したウィンドウとして表示されます。ウィンドウを固定するには、ウィンドウタイトルを右クリックし［Floating］をクリックします。タイトルバーをダブルクリックしてウィンドウを固定することもできます。

**図 6** ［メソッドエディタ］の［解析レポート］セクション

タスク 5. 解析レポートの印刷 （続き）

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
| --- | --- | --- |
| 2　レポートを印刷します。 | **a** 以下の複数の方法で、レポートを印刷できます。<br>• メインメニューから［**ファイル**］>［**印刷**］>［**解析レポート**］をクリックします。<br>• メインツールバーから［プリンタ］アイコンをクリックします。<br>• ［解析レポート］セクションが選択されている場合は［メソッドエディタ］ツールバーの［**解析レポートの印刷**］アイコン をクリックします。<br>• ［メソッドエディタ］の［解析レポート］セクションをクリックし［**解析レポートの印刷**］をクリックします。<br>• ［データナビゲータ］のデータファイルショートカットメニューから、［**解析レポート**］をクリックします。<br>**b** ［**レポートの内容**］を確認します。<br>**c** ［**レポートの印刷**］チェックボックスをオンにして、プリンタを選択します。<br>**d** ［**印刷プレビュー**］チェックボックスをオンにします。<br>**e** ［**OK**］ボタンをクリックします。<br>**f** レポートを確認します。<br>**g** ツールバーで［**印刷プレビューを閉じる**］アイコンをクリックします。 | ［メソッドエディタ］ツールバーの［実行］アイコン では、複数の処理から実行する処理を選択できる場合もあります。たとえば、［メソッドエディタ］ウィンドウの［レポート］>［共通レポートオプション］セクションに切り替えた場合、［実行］アイコンでは 4 つの異なる処理が使用可能です。矢印をクリックすると、可能な処理のリストが示され、どの処理を実行するかを選択できます。リストから違う処理を選択すると、デフォルトの処理が変更されます。実行ボタンをクリックすると、デフォルトの処理が実行されます。 |

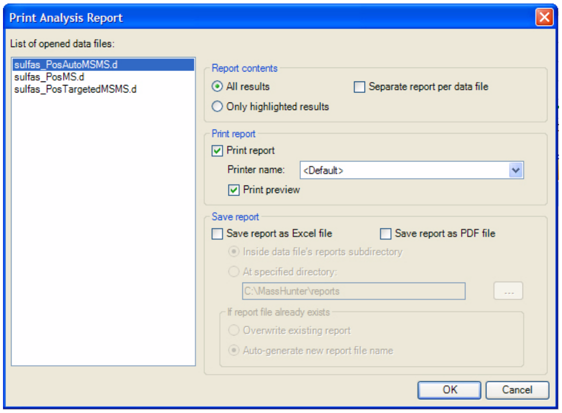



**図 7**　［解析レポートの印刷］ダイアログボックス

# タスク 6. 注釈の追加

以下のグラフィックウィンドウにはイメージ注釈またはテキスト注釈を追加することができます。

- ［クロマトグラム結果］ウィンドウ
- ［MS スペクトル結果］ウィンドウ
- ［結果の差］ウィンドウ
- ［デコンボリューション結果］ウィンドウ
- ［UV スペクトル結果］ウィンドウ

タスク 6. 注釈の追加

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
| --- | --- | --- |
| 1 クロマトグラム内の位置を選択します。 | a ［クロマトグラム結果］ウィンドウのツールバーで［**注釈**］ツール（ ）をクリックします。<br>b 注釈を追加するクロマトグラムペインの位置にカーソルを移動します。<br>c 右クリックして［**テキスト注釈の追加**］をクリックします。 | • カーソルが十字線に変更されます。このカーソルを使用して、注釈を追加する正確な位置を選択します。 |
| 2 ［テキスト注釈の追加 / 編集］ダイアログボックスにテキスト注釈に関する情報を入力します。 | a 注釈の［**テキスト**］を入力します。<br>b ［**テキストの色**］を選択します。<br>c ［**向き**］を選択します。<br>d ［**フォントスタイル**］と［**フォントサイズ**］を選択します。<br>e ［**固定**］または［**フローティング**］をクリックします。［**固定**］を選択する場合は、テキスト注釈のポインタのオプションを選択します。［**フローティング**］を選択する場合は、相対位置を設定します。位置の移動はグラフィックウィンドウを使用するとより簡単に変更できます。<br>f ［**OK**］をクリックします。 | • クロマトグラムおよびスペクトルには、複数の注釈を追加できます。<br>• ［注釈］ツールバーのアイコンを使用して、注釈の削除や編集、あるいはすべての注釈を選択することができます。 |

タスク 6. 注釈の追加 （続き）

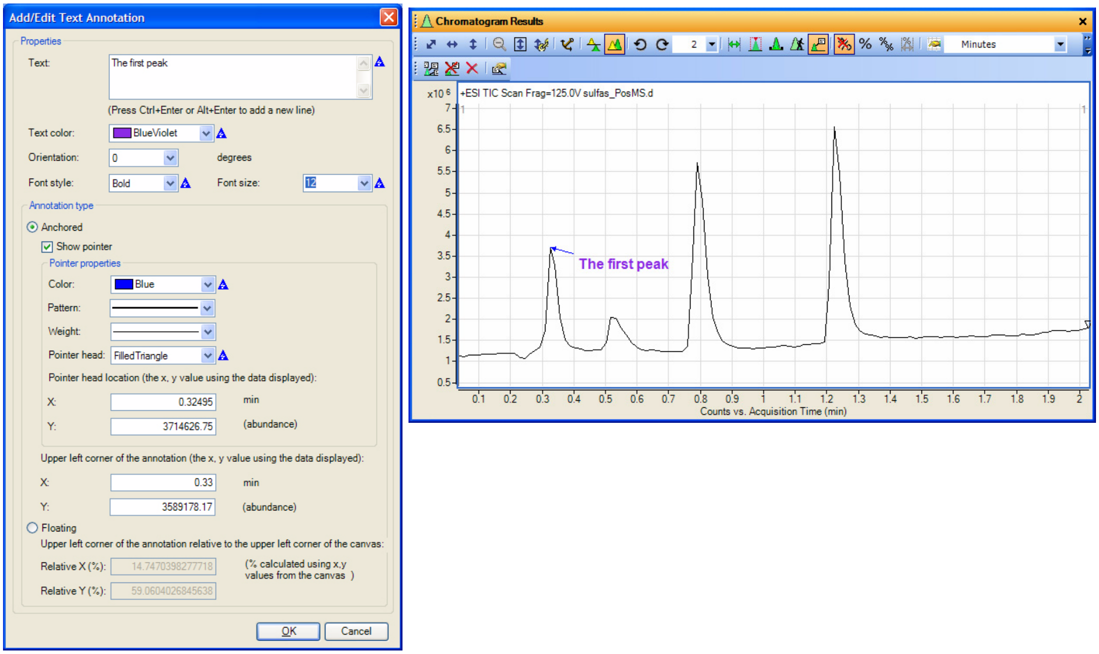



**図 8** ［テキスト注釈の追加 / 編集］ダイアログと［クロマトグラム結果］ウィンドウ

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
| --- | --- | --- |
| **3** ［クロマトグラム結果］ウィンドウで［範囲選択］ツールに切り替えます。 | • ［クロマトグラム結果］ツールバーの［範囲選択］アイコンをクリックします。 | • ［クロマトグラム結果］ツールバーでは 5 つのツールを切り替えることができます。詳細は、オンラインヘルプを参照してください。5 つのツールは以下の通りです。<br>• 範囲選択<br>• ピーク選択<br>• マニュアル積分<br>• クロマトグラムを進める<br>• 注釈 |

# MS のみのデータのタスク（TOF、Q-TOF、トリプル四重極）

TOF の MS データと、Q-TOF またはトリプル四重極の MS のみのデータを用いて、これらのタスクを実行します。

## タスク 7. クロマトグラムの抽出（MS のみ）

このタスクでは、元の TIC からクロマトグラムを抽出およびマージ（統合）します。

タスク 7. クロマトグラムの抽出（MS のみ）

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|
| 1 **sulfas-PosMS.d** データファイルの 2 つの質量から、抽出イオンクロマトグラム（EIC）を抽出およびマージします。<br>• m/z 値は 279.09102 と 311.08085 を使用してください。<br>• 個別の質量からのピークを1つのクロマトグラムにマージ（統合）します。 | **a** ［データナビゲータ］ウィンドウで、**sulfas-PosMS.d** 以外のデータファイルのチェックボックスをオフにします。<br>**b** 下記オプションまたは右のオプションのいずれかを用いて［クロマトグラムの抽出］ダイアログボックスを表示します。<br>• **［クロマトグラム］>［クロマトグラムの抽出］**をクリックします。<br>**c** **開いているデータファイルのリスト**で、**sulfas-PosMS.d** をクリックします。<br>**d** **［タイプ］**リストボックスで、**［EIC］**を選択します。<br>**e** **［m/z 値］**フィールドで、`279.09102, 311.08085` を入力します。<br>**f** **［複数の質量を 1 つのクロマトグラムにマージ］**チェックボックスをオンにして、EIC をマージします（複数の EIC を統合してひとつのクロマトグラムとして表示します）。<br>**g** **［OK］**をクリックします。<br>**h** ［クロマトグラム結果］ツールバーで**［リストペインの最大数］**が `3` に設定されていることを確認します。 | • 以下の方法でもクロマトグラムを抽出できます。<br>• クロマトグラム内を右クリックし、**［クロマトグラムの抽出］**をクリックします。<br>• ［データナビゲータ］から、**sulfas_PosMS.d** の**［TIC スキャン］**をハイライトした後、**［TIC スキャン］**を右クリックし**［クロマトグラムの抽出］**をクリックします。<br>• ［すべて］のMSレベルまたは［MS］の MS レベルを使用できます。<br>• 抽出後、抽出したクロマトグラムを自動的に積分するように選択することもできます。<br>• マススペクトルからクロマトグラムを抽出することもできます。 |

タスク 7. クロマトグラムの抽出（MS のみ）（続き）

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
| --- | --- | --- |

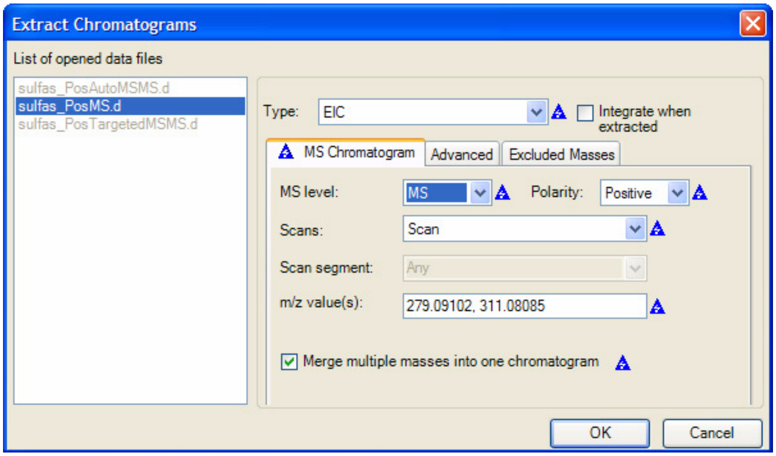



図 9　［クロマトグラムの抽出］ダイアログボックス

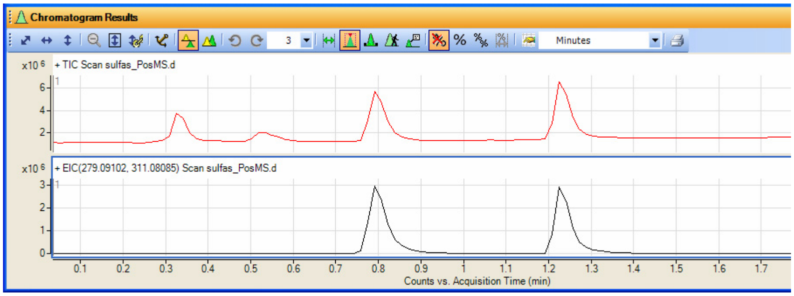



図 10　元の TIC とマージされた抽出イオンクロマトグラム（EIC）の比較

# タスク 8. クロマトグラムの積分（MS のみ）

このタスクでは、クロマトグラムを積分する方法、積分パラメータを変更して結果を変更する方法、各ピークのシグナル / ノイズ比を表示するさまざまな方法を学習します。

タスク 8. クロマトグラムの積分（MS のみ）

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
| --- | --- | --- |
| 1 **sulfas_PosMS.d** TIC クロマトグラムを積分します。 | • 以下のオプションのいずれかを用いて、**sulfas_PosMS.d** クロマトグラムを積分します。<br>◦ メインメニューから［**クロマトグラム**］>［**クロマトグラムの積分**］をクリックします。<br>◦ クロマトグラムをハイライトします。次に、クロマトグラムを右クリックし［**クロマトグラムの積分**］をクリックします。<br>◦ ［データナビゲータ］で、**sulfas_PosMS.d** >［ユーザークロマトグラム］セクションの［**TIC スキャン**］をハイライトします。次に、［TIC スキャン］を右クリックし［**クロマトグラムの積分**］をクリックします。 | • 積分では、default.m メソッドで選択されている［一般］積分方式（インテグレータ）が使用されます。［メソッドエディタ］ウィンドウの［クロマトグラム］>［積分（MS）］>［積分］タブで、この値を変更することができます。<br>• デフォルトパラメータを用いた積分では非常に小さなピークも検出されることに注意してください。 |

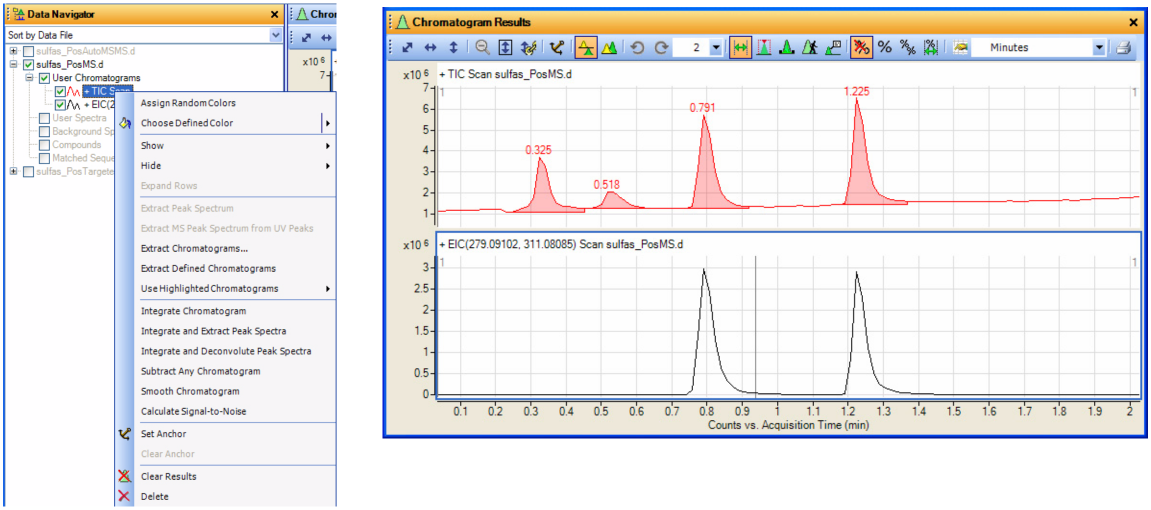



**図 11**　［データナビゲータ］のショートカットメニューと、積分された sulfas_PosMS.d の TIC

タスク 8. クロマトグラムの積分（MS のみ）（続き）

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
| --- | --- | --- |
| **2** タスク 1 で抽出した抽出イオンクロマトグラム（EIC）を積分します。 | • ［EIC］ウィンドウ内を右クリックし、**［クロマトグラムの積分］**をクリックします。 | • 通常、抽出の設定時に［クロマトグラムの抽出］ダイアログボックスで［抽出時に積分］チェックボックスをオンにします。 |
| **3** 積分した TIC のフィルタパラメータを変更します。<br>• MS データの［メソッドエクスプローラ］から積分メソッドエディタウィンドウを表示します。<br>• スレッショルドを変更し、2 つの最大ピークのみ積分されるようにします。 | **a**［メソッドエクスプローラ］から**［クロマトグラム］>［積分 (MS)］**をクリックし、［積分］タブを表示します。<br>**b** **［ピークフィルタ］**タブをクリックします。<br>**c**［ピークの最大数］セクションで**［ピーク数を高さベースで制限する］**チェックボックスをオンにして、2 を入力します。<br>**d**［データナビゲータ］ウィンドウで**［TIC スキャン］**をクリックします。 | • 現在のメソッドに保存されている値から設定を変更すると、青色三角形が表示されます。メソッドを保存すると、三角形は消えます。 |

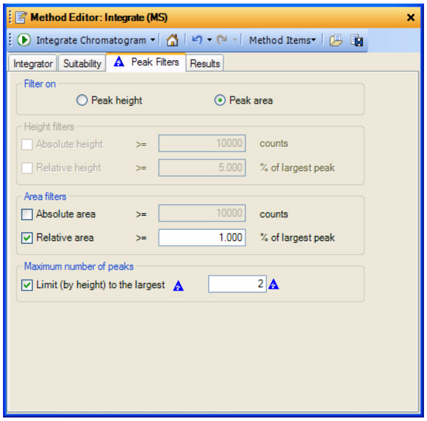



**図 12**　［ピーク数を高さベースで制限する］がオンの状態の［ピークフィルタ］タブ

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
| --- | --- | --- |
| **4** クロマトグラムを再積分します。 | • ［メソッドエディタ］ツールバーの**［クロマトグラムの積分］**アイコン をクリックし、新しい設定を用いて積分します。 | • これで、2 つの最大ピークのみが積分されます。 |

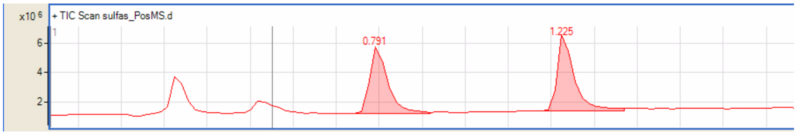
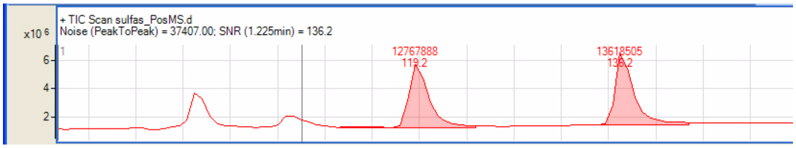



**図 13**　ピーク数が限定された積分結果

タスク 8. クロマトグラムの積分（MS のみ）（続き）

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
| --- | --- | --- |
| **5** シグナル / ノイズ比を計算します。<br>• **sulfas_PosMS.d** TIC を選択します。<br>• 最初の［ピークラベル］を［**面積**］に、クロマトグラフピークに対する 2 番目の［ピークラベル］を［**シグナル / ノイズ**］に設定します。<br>• ［メソッドエディタ］を開きます。<br>• ノイズ範囲に０.６３●０.７３を用いて、積分したピークのシグナル / ノイズ比を計算します。 | **a** ［**コンフィグレーション**］>［**クロマトグラムの表示オプション**］をクリックします。<br>**b** ［**クロマトグラム**］タブをクリックします。<br>**c** 最初の［**ピークラベル**］を［**面積**］に、2 番目の［**ピークラベル**］を［**シグナル / ノイズ**］に設定します。<br>**d** ［**OK**］をクリックします。<br>**e** ［メソッドエクスプローラ］で［**クロマトグラム**］>［**S/N 比の計算**］をクリックします。<br>**f** ［**ノイズ範囲を指定**］ボタンをクリックします。<br>**g** ノイズ範囲として **0.63 - 0.73** を入力し、［**S/N 比の計算**］アイコン をクリックします。 | • シグナル / ノイズ比を計算する前に、TIC がハイライトされていることを確認します。<br>• クロマトグラム上のノイズ範囲に指定した部分が、［クロマトグラム結果］ウィンドウに太字で描かれます。 |
| | <br>**図 14** ［面積］と［シグナル / ノイズ］のラベルが付いた積分済み TIC | |
| **6** デフォルトメソッドの設定を復元し、［メソッドエディタ］を閉じます。 | **a** 変更をキャンセルし、デフォルトメソッドから値を復元するには、［メソッドエディタ］ツールバーの［**最後に保存したファイルの値に復元**］ボタン をクリックします。<br>**b** ［**メソッドエディタ**］ウィンドウを閉じます。 | • シグナル / ノイズ計算の各アルゴリズムの詳細はオンラインヘルプを参照してください。 |
| **7** ピークラベルを［リテンションタイム］に戻します。 | **a** ［**コンフィグレーション**］>［**クロマトグラムの表示オプション**］をクリックします。<br>**b** ［**クロマトグラム**］タブをクリックします。<br>**c** 最初の［ピークラベル］を［**リテンションタイム**］に、2 番目の［ピークラベル］を［**なし**］に設定します。<br>**d** ［**OK**］をクリックします。 | • ［**デフォルト**］ボタンをクリックして、このダイアログボックスに元の値を復元することもできます。 |

# タスク 9. クロマトグラムからのスペクトルの抽出（MS のみ）

このタスクでは、クロマトグラムで指定したスペクトルを抽出します。特定のデータポイントからスペクトルを抽出したり、複数のデータポイントまたは範囲の平均から平均スペクトルを抽出したりすることができます。このタスクでは、スペクトル表示オプションの変更方法とバックグラウンドスペクトルの減算方法も学習します。

タスク 9. クロマトグラムからのスペクトルの抽出（MS のみ）

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
| --- | --- | --- |
| 1 **sulfas_PosMS.d** データファイルの 0.79 分のピークと最後のピークの特定のデータポイントのスペクトルを抽出します。<br>• 0.7 ～ 1.0 分の範囲を拡大した後、以下のコメントで説明するオプションのいずれかを用いて、0.79 分近辺のピークからスペクトルを抽出します。<br>• ［スペクトルプレビュー］を開きます。<br>• 1.1 ～ 1.4 分の範囲を拡大した後、1.22 分近辺ピークからスペクトルを抽出します。<br>• このスペクトルを［ユーザースペクトル］セクションにコピーします。<br>• 表示を変更し、2 つ以上のスペクトルを表示します。 | **a** 最初のピークを拡大するには、0.70 分の上で右クリックし、1.0 分にドラッグした後、離します。<br>**b** 0.79 分近辺のピークで、コメント列に記載したいずれかの方法でスペクトルを抽出します。<br>**c** ［クロマトグラム結果］ツールバーの［**オートスケール（ズーム解除）**］アイコン をクリックします。<br>**d** ［MS スペクトル結果］ツールバーの［**範囲選択**］アイコン をクリックします。<br>**e** ［スペクトルプレビュー］を開くには、［**スペクトルプレビュー**］ボタン をクリックします。<br>**f** 1.1 ～ 1.4 分の範囲を拡大します。<br>**g** 1.22 分近辺のピークで、コメント列に記載したいずれかの方法でスペクトルを抽出します。スペクトルは［スペクトルプレビュー］ウィンドウに表示されます。<br>**h** ［スペクトルプレビュー］ウィンドウでスペクトルを右クリックし［**ユーザースペクトルにコピー**］をクリックします。<br>［スペクトルプレビュー］ウィンドウは開いたままです。<br>**i** 必要に応じて［MS スペクトル結果］ツールバーの［**リストペインの最大数**］アイコン隣の矢印をクリックし、2 をクリックします。<br>**j** ［メソッドエディタ］ウィンドウを閉じます。 | • ズームする場合［ズーム中に Y 軸をオートスケール］アイコン がオンになっていることを確認します。「オン」の場合、アイコンの背景色はオレンジ色です。<br>• 以下のいずれかの方法でスペクトルを抽出できます。<br>　• クロマトグラムのデータポイントをダブルクリックします。<br>　• クロマトグラムのデータポイントをクリックした後、クロマトグラム内を右クリックします。［**MS スペクトルの抽出**］をクリックします。［クロマトグラム分析の抽出］ダイアログボックスが表示されます。**sulfas_PosMS.d** ファイルが選択されていることを確認し［**抽出**］をクリックします。<br>• スペクトルを初めて抽出する場合、スペクトルを含む［MS スペクトル結果］ウィンドウが表示され、スペクトルのタイプとリテンションタイムが［データナビゲータ］の［ユーザースペクトル］の下に表示されます。<br>• ［スペクトルプレビュー］ウィンドウが開いている場合、［スペクトルプレビュー］ウィンドウにはマニュアルで選択したスペクトルが表示されますが、そのスペクトルは［ユーザースペクトル］セクションには保管されません。<br>• ［スペクトルプレビュー］がオンの場合、新しいスペクトルを抽出すると、前のスペクトルは上書きされます。 |

タスク 9. クロマトグラムからのスペクトルの抽出（MS のみ）（続き）

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|

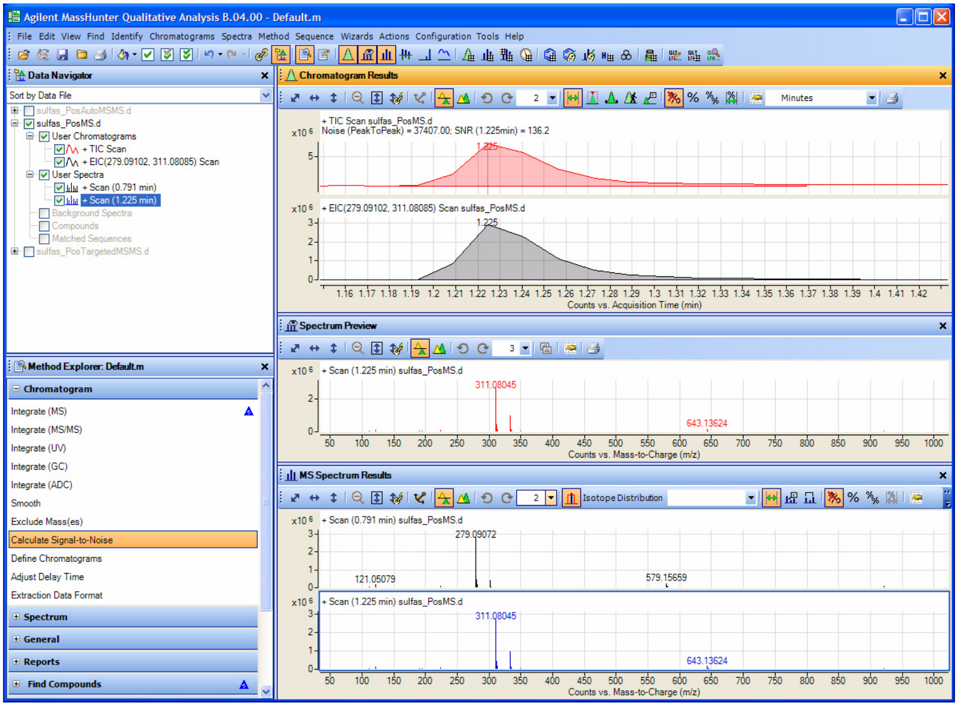


**図 15** sulfas_PosMS.d ファイルの二つの積分されたピークから抽出したスペクトルを表示するメインウィンドウ

タスク 9. クロマトグラムからのスペクトルの抽出（MS のみ）（続き）

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
| --- | --- | --- |
| **2** **sulfas_PosMS.d** データファイルで、最後の積分ピークの指定範囲内のすべてのポイントを平均したスペクトルを抽出します。<br>• 既存の［ユーザースペクトル］すべてを削除します。<br>• クロマトグラムのズームを解除します。<br>• ［スペクトルプレビュー］をオフにします。<br>• ［クロマトグラム］ツールバーの［範囲選択］アイコンを使用します。<br>• 範囲設定でピークを選択します。<br>• 記載されたオプションを用いてスペクトルを抽出します。 | **a** 削除するユーザースペクトルをハイライトします（複数のスペクトルをハイライトするには〈**Ctrl**〉キーを使用します）。<br>**b** 選択した［ユーザースペクトル］を右クリックし［**削除**］をクリックします。<br>**c** ［削除］ダイアログボックスが表示される場合［**はい**］をクリックします。<br>**d** ［**X 軸と Y 軸のオートスケール**］アイコン をクリックし、完全にズームを解除します。<br>**e** ［**スペクトルプレビュー**］ウィンドウを閉じます。<br>**f** ［クロマトグラム］ツールバーの［**範囲選択**］アイコン をクリックします。<br>**g** 最後の積分ピークの左側をクリックし、ピークの右側までドラッグします。<br>**h** 下記または右記のオプションを用いて、平均スペクトルを抽出します。<br>• ピークの範囲内を右クリックし、ショートカットメニューから［**MS スペクトルの抽出**］をクリックします。<br>• ［スペクトルの抽出］ダイアログボックスの［**抽出**］をクリックします。 | • ［データナビゲータ］ウィンドウのユーザースペクトル行を右クリックして［**削除**］からでも、すべてのユーザースペクトルを削除できます。<br>• クロマトグラムの選択した範囲をダブルクリックしても、平均スペクトルを抽出できます。<br>• ［メッセージボックスオプション］ダイアログボックスから、クロマトグラムを削除するときに、確認を求められるかどうかを変更できます。このダイアログボックスは［**コンフィグレーション**］**>**［**メッセージボックスオプション**］コマンドをクリックすると表示されます。<br>• 複数のデータファイルが読み込まれている場合に限り、［スペクトルの抽出］ダイアログボックスが表示されます。 |

**図 16**　最後のピークの選択範囲から抽出した平均スペクトル

タスク 9. クロマトグラムからのスペクトルの抽出（MS のみ）（続き）

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
| --- | --- | --- |
| 3 **sulfas_PosMS.d**　データファイルに対して積分したピーク 1 と 2 の範囲を一緒に平均したスペクトルを抽出します。<br>• ヒント：［**範囲選択**］アイコンと〈**Ctrl**〉キーを用いて、まずひとつめのピークの範囲を選択します。<br>• 右記のいずれかのオプションを用いて、スペクトルを抽出します。 | **a**　［クロマトグラム結果］ウィンドウのタイトルバーをクリックします。［クロマトグラム結果］ウィンドウがアクティブウィンドウになりますが、選択したエリアは失われません。<br>**b**　〈**Ctrl**〉キーを押したままにします。<br>**c**　最初の積分ピークの左側をクリックし、ピークの右側までドラッグします。<br>**d**　マウスを離します。<br>**e**　〈**Ctrl**〉キーを離します。<br>**f**　以下のオプションまたは右記のオプションを用いて、平均スペクトルを抽出します。<br>• いずれかのピークの選択範囲内をダブルクリックします。 | • 2 番目のピークはステップ 2 で既に範囲が選択されています。<br>• クロマトグラム内を右クリックした後、［**MS スペクトルの抽出**］をクリックすることでも、スペクトルを抽出できます。［スペクトルの抽出］ダイアログボックスが表示されます。［**抽出**］をクリックします。 |

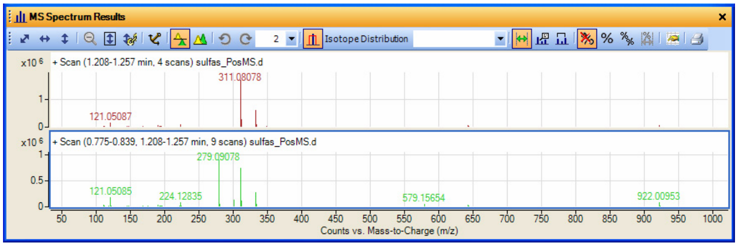
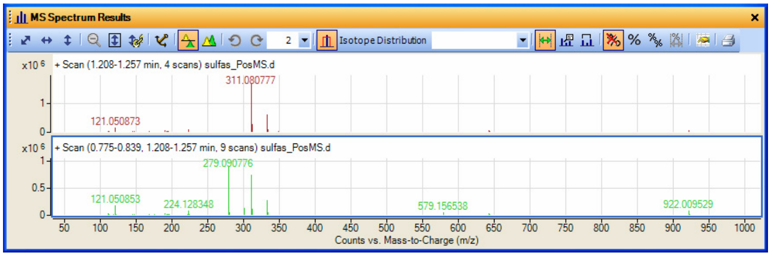
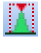



**図 17**　複数の範囲から作成された、平均化スペクトル

タスク 9. クロマトグラムからのスペクトルの抽出（MS のみ）（続き）

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|
| **4** **sulfas_PosMS.d** のスペクトル表示オプションを変更します。<br>• 小数点以下の桁数を現在の設定より 1 桁大きく変更します。<br>• 元の桁数に戻します。 | **a** ［コンフィグレーション］>［**MS および MS/MS スペクトルの表示オプション**］をクリックします。<br>**b** ［**MS および MS/MS スペクトル**］タブをクリックします。<br>**c** m/z 値の［**小数点以下の桁数**］を現在の設定より 1 桁大きく変更します。<br>**d** ［**OK**］をクリックします。 | • ［MS スペクトル結果］ウィンドウで［表示オプション］アイコン をクリックすることもできます。<br>• ラベルには 1 桁多い *m/z* が表示されることを確認してください。 |
| |  | |
| | **e** a と b のステップを繰り返した後、［**小数点以下の桁数**］を現在の設定より 1 桁小さく設定します。<br>**f** ［**OK**］をクリックします。 | • ラベルには元の桁数が表示されることを確認してください。 |

タスク 9. クロマトグラムからのスペクトルの抽出（MS のみ）（続き）

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|
| **5** **sulfas_PosMS.d** のピークスペクトルを抽出する際、バックグラウンドスペクトルを減算します。<br>• ［データナビゲータ］の［ユーザースペクトル］にあるスキャンをすべて削除します。<br>• 0.0 ～ 0.25 分の範囲のバックグラウンドスペクトルを抽出し、［データナビゲータ］のバックグラウンドスペクトルフォルダに表示させます。<br>• 減算には現在のバックグラウンドMSスペクトルを使用します。<br>• クロマトグラムを積分し、積分したピークを 4 つに制限します。<br>• 3番目の積分ピークのピークスペクトルを抽出します。 | **a** ［データナビゲータ］の［**ユーザースペクトル**］にある、削除する［ユーザースペクトル］をハイライトします（〈**Ctrl**〉キーを押す）。<br>**b** スペクトルを右クリックし［**削除**］をクリックします。［**はい**］をクリックします。<br>**c** ［クロマトグラム結果］ツールバーで［**範囲選択**］アイコンが選択されていることを確認し、0.0 ～ 0.25 分の間にカーソルをドラッグします。<br>**d** 範囲内を右クリックし、［**MS スペクトルをバックグラウンドに抽出**］をクリックします。<br>**e** ダイアログボックスが表示されたら、Sulfas_PosMS.d データファイルを選択して［**OK**］をクリックします。<br>**f** ［メソッドエクスプローラ］で［**スペクトル**］>［**抽出 (MS)**］をクリックします。<br>**g** ［**ピークスペクトル抽出 (MS)**］タブをクリックします。<br>**h** ［**ピークスペクトルバックグラウンド**］で、MS スペクトルの［**現在のバックグラウンドスペクトル**］を選択します。<br>**i** ［メソッドエクスプローラ］で［**クロマトグラム**］>［**積分 (MS)**］をクリックします。<br>**j** ［**ピークフィルタ**］タブをクリックします。<br>**k** ［**ピーク数を高さベースで制限する**］チェックボックスをオンにし、4 と入力します。<br>**l** メインメニューから、［**クロマトグラム**］>［**クロマトグラムの積分**］>［**クロマトグラム全体**］をクリックします。<br>**m** ［クロマトグラム結果］ツールバーの［**ピーク選択**］アイコン  をクリックします。<br>**n** 3 番目の積分ピークを選択し、次のオプションのいずれかを使用してピークスペクトルを抽出します。<br>• ピークをダブルクリックします。 | • 手動でスペクトルを抽出する場合に減算するスペクトルを設定するには、［マニュアル抽出］タブで［**手動スペクトルバックグラウンド**］を選択します。このタブは、抽出されるピークスペクトルには影響しません。<br>• この処理の最後に、抽出したピークスペクトルすべてに対して、指定したバックグラウンドスペクトルが自動的に減算されることを確認してください。<br>• バックグラウンドスペクトルをバックグラウンドスペクトルフォルダに移動させる別の方法は、以下のステップのとおりです。<br>• 選択した範囲をダブルクリックし、平均化したスペクトルを抽出します。<br>• スペクトルウィンドウ内を右クリックし［**バックグラウンドスペクトルに移動**］をクリックします。 |

タスク 9. クロマトグラムからのスペクトルの抽出（MS のみ）（続き）

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|
| | • ピークを右クリックし［**ピークスペクトルの抽出**］をクリックします。<br>• ［**クロマトグラム**］>［**ピークスペクトルの抽出**］をクリックします。<br>• ［データナビゲータ］ウィンドウでクロマトグラムを右クリックし、［**ピークスペクトルの抽出**］をクリックします。<br>o ［データナビゲータ］ウィンドウでクロマトグラムを右クリックし、［**ピークスペクトルの抽出**］をクリックします。 | |

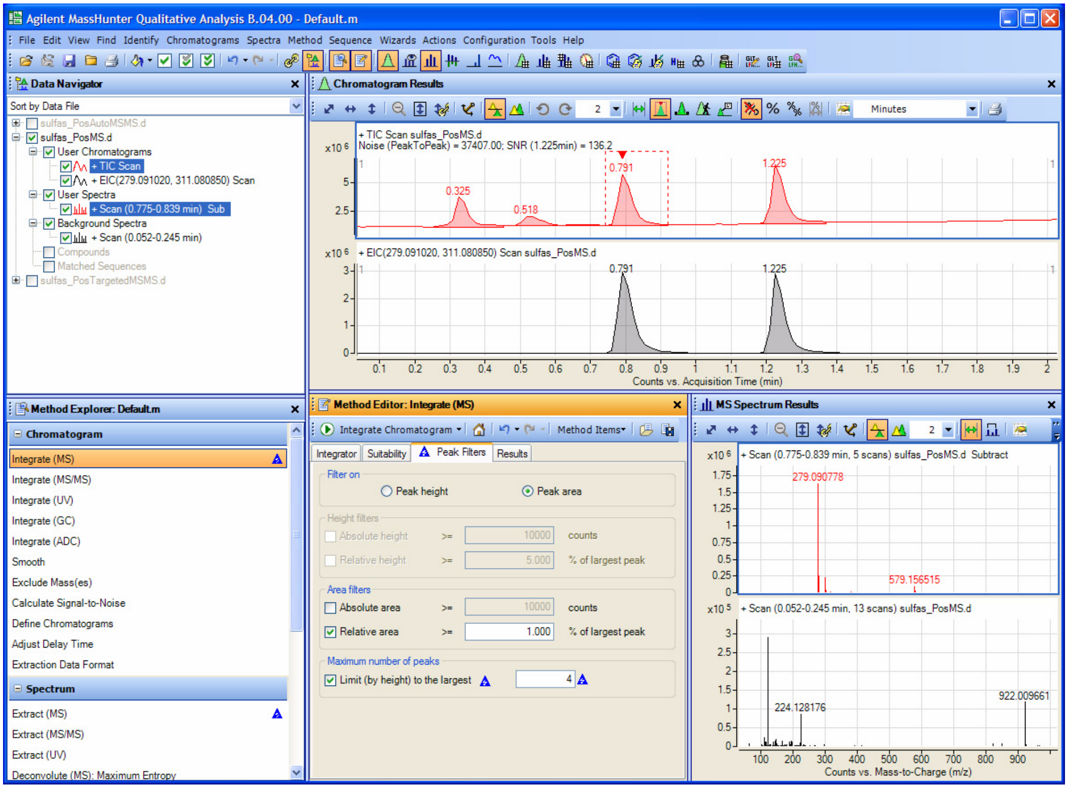


図 18　バックグラウンドが減算されたスペクトル

# タスク 10. 質量差の追加

質量差は、スペクトルの 2 点間の差異を示します。以下のグラフィックウィンドウに質量差を追加できます。

- ［MS スペクトル結果］ウィンドウ
- ［デコンボリューション結果］ウィンドウ

修飾の質量差およびアミノ酸の質量差は［デコンボリューション結果］ウィンドウに表示されるデコンボリュートスペクトルに追加することもできます。修飾またはアミノ酸が原因で質量が変更されている場合、質量差のラベルは修飾またはアミノ酸になります。その他の場合は、単純な質量差をレポートします。

タスク 10. 質量差の追加

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|
| 1 前のタスクで作成されたピークスペクトルに質量差を追加します。 | a ［MS スペクトル結果］ウィンドウで、ツールバーの［**質量差**］ツール（ ）をクリックします。<br>b 質量差を追加するスペクトルペインの位置にカーソルを移動します。<br>c スペクトルの質量差の終了点までカーソルをドラッグします。カーソルをドラッグすると、質量差の値が変化します。マウスボタンを離すと、質量差が追加されます。 | • MS スペクトルの抽出については、33 ページの「タスク 9. クロマトグラムからのスペクトルの抽出（MS のみ）」を参照してください。<br>• カーソルが矢印に変更されます。このカーソルを使用して、質量差の開始点と終了点を選択します。 |
| 2 質量差の色を別の色に変更します。 | a 前のステップで作成した質量差をクリックします。<br>b ［MS スペクトル結果］の質量差ツールバーで［質量差のプロパティ］ボタン（ ）をクリックします。<br>c ［**開始 X**］と［**終了 X**］を入力します。<br>d ［**テキストの色**］を選択します。<br>e ［**フォントスタイル**］と［**フォントサイズ**］を選択します。<br>f ［**OK**］をクリックします。 | • スペクトルには複数の質量差を追加することができます。<br>• ［質量差］ツールバーのアイコンを使用して、質量差の削除や編集、あるいはすべての質量差を選択することができます。 |

タスク 10. 質量差の追加 （続き）

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
| --- | --- | --- |

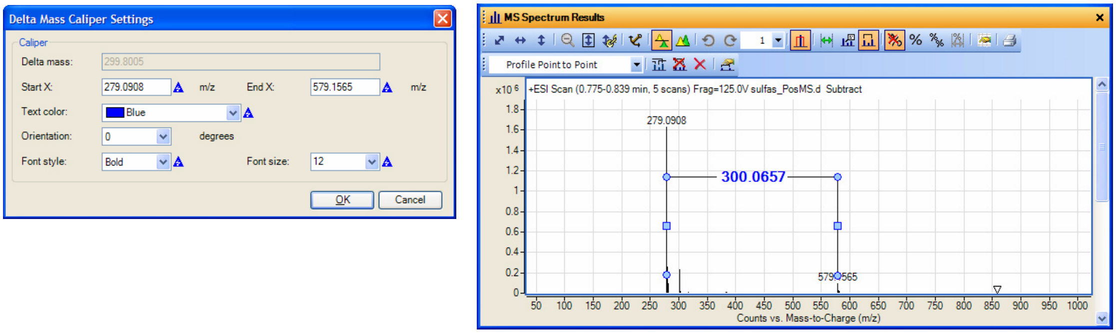



**図 19** ［質量差の設定］ダイアログボックスと［MS スペクトル結果］ウィンドウ

# LC/MS/MS データのタスク（Q-TOF とトリプル四重極）

## タスク 11. クロマトグラムの抽出（LC/MS と LC/MS/MS）

このタスクでは、ピークを積分するために、MS データのクロマトグラム 1 つと MS/MS データのクロマトグラム 1 つを抽出します。オリジナルのクロマトグラムの TIC には MS と MS/MS の両データが含まれるため、積分できません。

タスク 11. クロマトグラムの抽出（MS と MS/MS）

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
| --- | --- | --- |
| 1 **sulfas_PosTargetedMSMS.d** データファイルの MS データの TIC を抽出します。 | a ［データナビゲータ］で、**sulfas_PosTargetedMSMS.d** のチェックボックスをオンにし、その他のデータファイルのチェックボックスをオフにします。<br>b 下記オプションまたは右のオプションのいずれかを用いて、［クロマトグラムの抽出］ダイアログボックスを表示します。<br>• **［クロマトグラム］>［クロマトグラムの抽出］**をクリックします。<br>c **［開いているデータファイルのリスト］**から、必要に応じて **sulfas_PosTargetedMSMS.d** をクリックします。<br>d **［タイプ］**が **［TIC］**になっていることを確認します。<br>e ［MS レベル］リストから、**［MS］**をクリックします。<br>f **［OK］**をクリックします。 | • 以下の方法でもクロマトグラムを抽出できます。<br>• クロマトグラムを右クリックし、**［クロマトグラムの抽出］**をクリックします。<br>• ［データナビゲータ］から、**［ユーザークロマトグラム］>［TIC MS ( すべて )］**をクリックした後、**［TIC MS ( すべて )］**を右クリックし**［クロマトグラムの抽出］**をクリックします。<br>• マススペクトルからもクロマトグラムを抽出できます。 |

タスク 11. クロマトグラムの抽出（MS と MS/MS）（続き）

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|

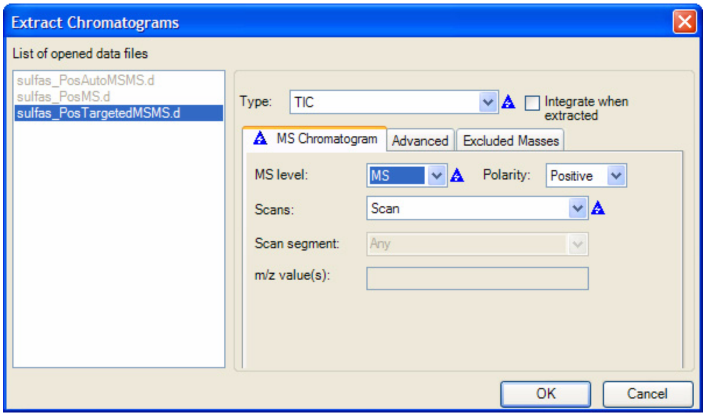



**図 20**　［クロマトグラムの抽出］ダイアログボックス

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|
| **2** MS/MS データのプロダクトイオンに基づく別のクロマトグラムを抽出します。<br>• 今回は抽出したクロマトグラムの積分を選択します。 | **a** ステップ 1 のステップ b ～ c を繰り返します。<br>**b** ［タイプ］に **EIC** をクリックします。<br>**c** **［MS レベル］**リストから**［MS/MS］**をクリックします。<br>**d** ［スキャン］リストから**［プロダクトイオン］**をクリックします。<br>**e** ［プリカーサイオン m/z］で、279.09100 を選択します。<br>**f** ［m/z 値］テキストボックスに、186.03299 を入力します。<br>**g** **［抽出時に積分］**チェックボックスをオンにします。<br>**h** **［OK］**をクリックします。 | • ［m/z 値］テキストボックスには、範囲を入力することもできます（例 100 - 300 など）。 |

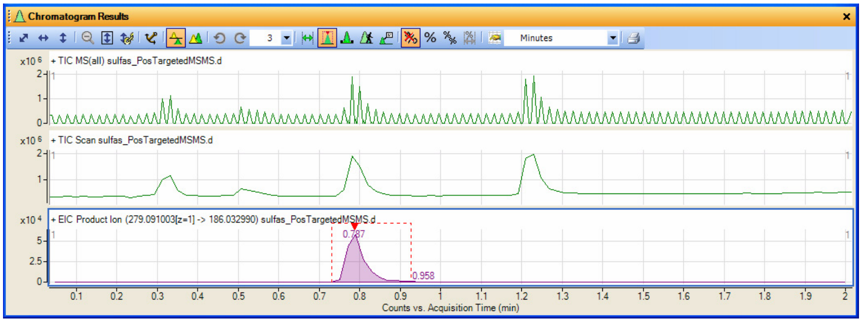



**図 21**　元の TIC と MS データの TIC、MS/MS データの EIC の比較

# タスク 12. クロマトグラムの積分（LC/MS と LC/MS/MS）

このタスクでは、クロマトグラムを積分する方法、積分パラメータを変更して結果を変更する方法、そして MS/MS データに対して積分したピークの S/N 比を計算するさまざまな方法を学習します。

オリジナルの Q-TOF TIC クロマトグラムには、特定の順序になっていない可能性のある MS と MS/MS の両データが含まれるので、積分できません。

タスク 12. クロマトグラムの積分（LC/MS と LC/MS/MS）

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|
| **1** 右記のいずれかのオプションを用いて、**sulfas_PosTargetedMSMS.d** データファイルの TIC スキャンクロマトグラムを積分します。 | **a** TIC スキャンクロマトグラムをハイライトし、以下のコマンドのいずれかを選択し、クロマトグラムを積分します。<br>• メニューバーから［**クロマトグラム**］>［**クロマトグラムの積分**］をクリックします。<br>• ［クロマトグラム］ウィンドウ内を右クリックし［**クロマトグラムの積分**］をクリックします。<br>• ［データナビゲータ］ウィンドウで、**sulfas_PosTargetedMSMS.d** > ［**ユーザークロマトグラム**］>［**TIC スキャン**］を選択し、［TIC スキャン］を右クリックして［**クロマトグラムの積分**］をクリックします。 | • クロマトグラムのすべてのピークが積分されたことを確認してください。<br>• MS データ、MS/MS データ、UV データ、ADC データに使用する積分を［メソッドエディタ］ウィンドウで選択します。 |
| **2** スレッショルドを変更し、積分するピークを減らします。<br>• スレッショルドを変更し、2 つの最大ピークのみ積分されるようにします。 | **a** ［メソッドエクスプローラ］ウィンドウから［**クロマトグラム**］>［**積分（MS）**］をクリックし［積分］タブを表示します。<br>**b** ［**ピークフィルタ**］タブをクリックします。<br>**c** ［ピークの最大数］ボックスで、必要に応じて［**ピーク数を高さベースで制限する**］をオンにして、2 と入力します。 | • 現在のメソッドに保存されている値から設定を変更すると、青色三角形が表示されます。メソッドを保存すると、三角形は消えます。 |

タスク 12. クロマトグラムの積分（LC/MS と LC/MS/MS）（続き）

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|

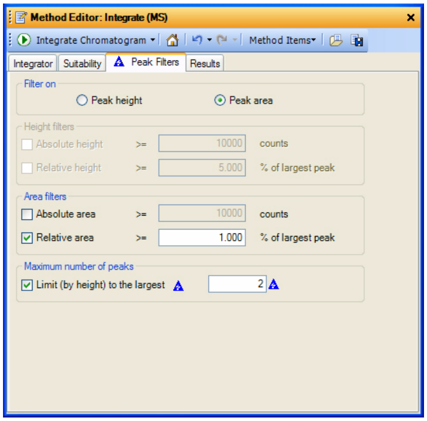



**図 22**　［ピーク数を高さベースで制限する］チェックボックスがオンの状態の［ピークフィルタ］タブ

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|
| **3** クロマトグラムを再積分します。 | **d** ［メソッドエディタ］ツールバーの ボタンをクリックし、新しい設定を用いて積分します。 | • これで、2 つの最大ピークのみが積分されます。 |

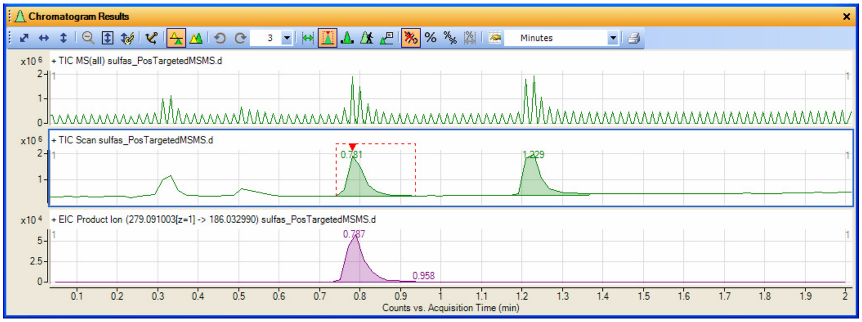



**図 23**　ピーク数を制限して積分された TIC MS と MS/MS のクロマトグラム

タスク 12. クロマトグラムの積分（LC/MS と LC/MS/MS）（続き）

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|
| **4** 右記のいずれかのオプションを用いて、**sulfas_PosTargetedMSMS.d** データファイルの EIC プロダクトイオンクロマトグラムを積分します。 | **a** EIC プロダクトイオンクロマトグラムをハイライトし、以下のコマンドのいずれかを選択し、クロマトグラムを積分します。<br>• メニューバーから［**クロマトグラム**］>［**クロマトグラムの積分**］をクリックします。<br>•［クロマトグラム］ウィンドウ内を右クリックし［**クロマトグラムの積分**］をクリックします。<br>•［データナビゲータ］ウィンドウで、**sulfas_PosTargetedMSMS.d** >［**ユーザークロマトグラム**］>［**EIC プロダクトイオン**］を選択し、［**EIC プロダクトイオン**］を右クリックして［**クロマトグラムの積分**］をクリックします。 | • クロマトグラムのすべてのピークが積分されたことを確認してください。<br>• MS データ、MS/MS データ、UV データ、GC データ、ADC データに使用するインテグレータは［メソッドエディタ］ウィンドウの［積分］タブで選択します。MS データ、MS/MS データ、UV および GC データ、ADC データに、異なるインテグレータを選択することができます。 |
| **5** フィルタを高さフィルタに変更し、絶対高さ制限値を設定します。 | **a**［メソッドエクスプローラ］から、［**クロマトグラム**］>［**積分 (MS/MS)**］をクリックし、［積分］タブを表示します。<br>**b**［**ピークフィルタ**］タブをクリックします。<br>**c**［**フィルタをオン**］で［**ピーク高さ**］をクリックします。<br>**d**［高さフィルタ］で、［**絶対高さ**］チェックボックスをオンにします。 | • MS/MS データのデフォルトにより、MS/MS インテグレータが選択されます。<br>• 現在のメソッドに保存されている値から設定を変更すると、青色三角形が表示されます。メソッドを保存すると、三角形は消えます。 |
| **6** クロマトグラムを再積分します。 | **e**［メソッドエディタ］ツールバーの アイコンをクリックし、新しい設定を用いて積分します。 | • 最大ピークのみが積分されたことを確認してください。 |

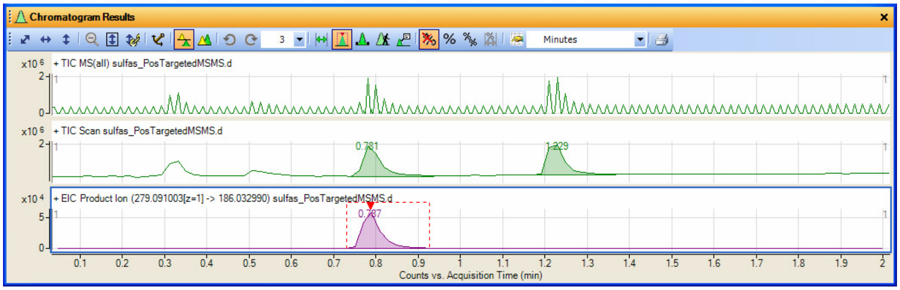



**図 24**　最大ピーク表示のスレッショルドを設定して積分された TIC MS と MS/MS のクロマトグラム

タスク 12. クロマトグラムの積分（LC/MS と LC/MS/MS）（続き）

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|
| **7** プロダクトイオンのEICのシグナル / ノイズ比を計算します。<br>• 最初の［ピークラベル］を［**面積**］に、クロマトグラフピークに対する 2 番目の［ピークラベル］を［**シグナル / ノイズ**］に設定します。<br>• ［メソッドエディタ］を開きます。<br>• ノイズ範囲に０.０～０.76を用いて、積分したピークのシグナル / ノイズ比を計算します。 | **a** ［**コンフィグレーション**］>［**クロマトグラムの表示オプション**］をクリックし、最初の［ピークラベル］を［**面積**］に、2 番目の［ピークラベル］を［**シグナル / ノイズ**］に設定します。［**OK**］をクリックします。<br>**b** ［クロマトグラム］セクションの［メソッドエクスプローラ］で、［**S/N 比の計算**］を選択します。<br>**c** ［**ノイズ範囲を指定**］ボタンをクリックします。ノイズ範囲として **0.0 - 0.76** を入力し、［**S/N 比の計算**］アイコン をクリックします。 | • シグナル / ノイズ比を計算する前に、EIC がハイライトされていることを確認します。<br>• デフォルトの［**ノイズ定義**］アルゴリズムは［ピーク - ピーク］です。各**ノイズ定義**に関する情報は、オンラインヘルプを参照してください。<br>• クロマトグラム上のノイズ範囲に指定した部分が、［クロマトグラム結果］ウィンドウに太字で描かれます。 |

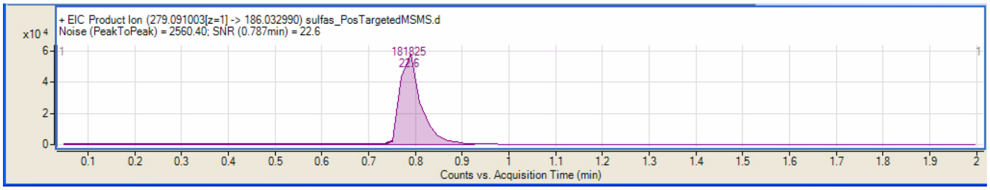



**図 25** MS/MS EIC プロダクトイオンの S/N 比結果

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|
| **8** 現在のメソッドに保存されている設定を復元し［メソッドエディタ］を閉じます。 | **a** ［メソッドエクスプローラ］の［**クロマトグラム**］>［**S/N 比の計算**］セクションをクリックします。<br>**b** ［メソッドエディタ］ツールバーの［**最後に保存したファイルの値に復元**］アイコン をクリックします。<br>**c** ［メソッドエクスプローラ］の［**クロマトグラム**］>［**積分 (MS/MS)**］セクションをクリックします。<br>**d** アイコン をクリックします。<br>**e** ［メソッドエクスプローラ］の［**クロマトグラム**］>［**積分 (MS)**］セクションをクリックします。<br>**f** アイコン をクリックします。<br>**g** ［**メソッドエディタ**］を閉じます。 | • 変更をキャンセルし、読み込まれたメソッドから値を復元するには、［メソッドエディタ］ツールバーの［**最後に保存したファイルの値に復元**］アイコン をクリックします。 |

タスク 12. クロマトグラムの積分（LC/MS と LC/MS/MS）（続き）

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
| --- | --- | --- |
| **9** クロマトグラムのピークラベルを［リテンションタイム］に戻します。 | **a**［**コンフィグレーション**］>［**クロマトグラムの表示オプション**］をクリックします。<br>**b** 最初のピークラベルに［**リテンションタイム**］を選択し、2 番目のピークラベルに［**なし**］を選択します。<br>**c**［**OK**］をクリックします。 | • ［クロマトグラム結果］ウィンドウで［表示オプション］アイコン をクリックして、［クロマトグラムの表示オプション］ダイアログボックスを開くこともできます。 |
| **10** オリジナルのクロマトグラムを除き、すべてのクロマトグラムを削除します。 | **a**［データナビゲータ］ウィンドウの［ユーザークロマトグラム］の下で、オリジナルのクロマトグラムを除きすべてのクロマトグラムをハイライトします。<br>**b** ハイライトしたクロマトグラムを右クリックし、［**削除**］をクリックします。<br>**c**［削除］メッセージボックスが表示されたら、［**はい**］をクリックします。 | |

# タスク 13. クロマトグラムからのスペクトルの抽出（LC/MS と LC/MS/MS）

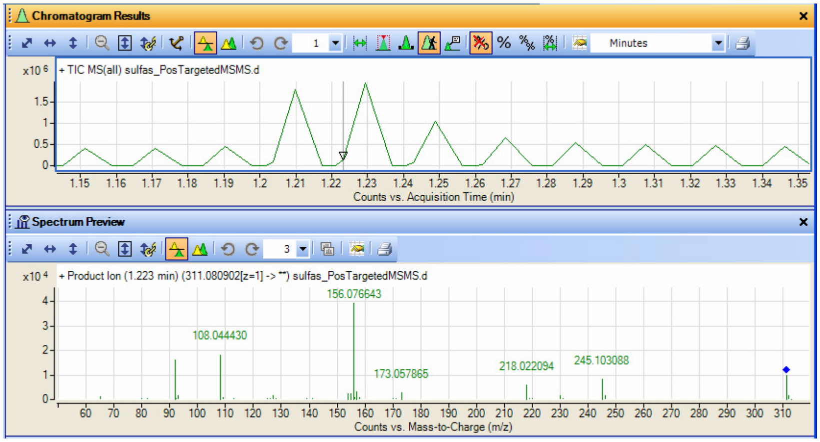
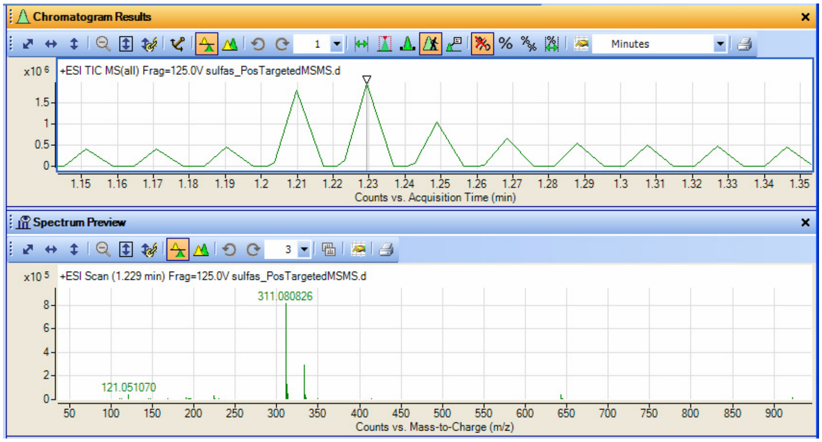
このタスクでは、クロマトグラムで指定したスペクトルを抽出します。定性分析プログラムでは、特定のデータポイントからスペクトルを抽出したり、複数のデータポイントまたは範囲の平均から平均スペクトルを抽出したりすることができます。

このタスクでは、クロマトグラムを進める方法、スペクトル表示オプションの変更方法、そしてバックグラウンドスペクトルの減算方法も示します。

タスク 13. クロマトグラムからのスペクトルの抽出（LC/MS と LC/MS/MS）

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|
| **1** クロマトグラムを進め、**sulfas_PosTargetedMSMS.d** の最後のピークのプリカーサイオンとプロダクトイオンを表示します。<br>• 1.15 ～ 1.35 分の範囲を拡大します。<br>• ［クロマトグラムを進める］アイコンを使用します。<br>• 約 1.15 分に始まるスペクトルをレビューし、矢印を右に移動させます。 | **a** ［データナビゲータ］ウィンドウで ［**TIC MS ( すべて )**］クロマトグラムをクリックします。<br>**b** 最後のピークを拡大するには、1.15 分のピークの上で右クリックし、1.35 分にドラッグした後、離します。<br>**c** ［メソッドエディタ］ウィンドウを閉じます。<br>**d** ［クロマトグラム結果］ツールバーの［**クロマトグラムを進める**］アイコン をクリックします。<br>**e** ［クロマトグラムを進める］カーソルを約 1.15 分の X 軸上に移動させ、クリックします。<br>**f** スペクトル間を移動するには、キーボードの左右の矢印キーを使用します。 | • ［クロマトグラムを進める］ツールは、プリカーサイオンとプロダクトイオンを同定するために、MS/MS データで特に便利です。<br>• ［クロマトグラム結果］ウィンドウでクリックする各ポイントのスペクトルは、自動的に開く［スペクトルプレビュー］ウィンドウに自動的に表示されます。 |

タスク 13. クロマトグラムからのスペクトルの抽出（LC/MS と LC/MS/MS）（続き）

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|
|  図 26 ［クロマトグラムを進める］アイコンで、1.223 分の MS/MS プロダクトイオンを表示 | | |
|  図 27 ［クロマトグラムを進める］アイコンで、1.229 分のピークの MS スキャンを表示 | | クロマトグラムタイトルおよびスペクトルタイトルにフラグメンタ電圧を含める場合は［クロマトグラムの表示オプション］および［**MS** および **MS/MS** スペクトルの表示オプション］ダイアログボックスの［展開済み］チェックボックスをオンにします。 |

タスク 13. クロマトグラムからのスペクトルの抽出（LC/MS と LC/MS/MS）（続き）

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
| --- | --- | --- |
| 2 **sulfas_PosTargetedMSMS.d** データファイルの 0.33 分のピークと最後のピークの特定のデータポイントのスペクトルを抽出します。<br>• 0.3 ～ 0.4 分の範囲を拡大した後、［コメント］に記載のオプションのいずれかを用いて、0.33 分近辺のピーク（MS）の 1 つからスペクトルを抽出した後、谷（MS/MS）の 1 つからのスペクトルを抽出します。<br>• 1.15 ～ 1.25 分の範囲を拡大した後、1.23 分近辺のピークの 1 つからスペクトルを抽出します（谷からはまだ抽出しません）。<br>• 表示を変更し、3 つ以上のスペクトルを表示します。 | **a** ［クロマトグラム結果］ツールバーの［**範囲選択**］アイコン をクリックします。<br>**b** ［スペクトルプレビュー］ウィンドウを閉じます。<br>**c** ［クロマトグラム結果］ツールバーの［**オートスケール（ズーム解除）**］アイコン をクリックします。<br>**d** 最初のピークを拡大するには、0.3 分のピークの上で右クリックし、0.4 分にドラッグした後、離します。<br>**e** 0.33 分近辺のピークで、コメント列に記載したいずれかの方法でスペクトルを抽出します。<br>**f** 0.34 分近辺の谷で、スペクトルを抽出します。<br>**g** ［クロマトグラム結果］ツールバーの［**オートスケール（ズーム解除）**］アイコン をクリックします。<br>**h** 1.15 ～ 1.25 分の範囲を拡大します。<br>**i** 1.23 分近辺のピークで、コメント列に記載したいずれかの方法でスペクトルを抽出します（谷のスペクトルはまだ抽出しません）。<br>**j** 必要に応じて［MS スペクトル結果］ツールバーの［**リストペインの最大数**］アイコン隣の矢印をクリックし、3 をクリックします。 | • ズームする場合［ズーム中に Y 軸をオートスケール］アイコン がオンになっていることを確認します。オンの場合、アイコンの背景色はオレンジ色です。<br>• 以下のいずれかの方法でスペクトルを抽出できます。<br>　• クロマトグラムのデータポイントをダブルクリックします。<br>　• クロマトグラムのデータポイントをクリックした後、クロマトグラム内を右クリックします。［**MS スペクトルの抽出**］をクリックします。［スペクトルの抽出］ダイアログボックスが表示されます。<br>　**sulfas_PosTargetedMSMS.d** ファイルが選択されていることを確認し［スペクトルの抽出］ダイアログボックスの［**抽出**］をクリックします。<br>• スペクトルを初めて抽出した時に、［MS スペクトル結果］ウィンドウが表示され、スペクトルが表示されます。［ユーザースペクトル］の下にそのスペクトルのタイプとリテンションタイムが表示されます。抽出したスペクトルすべては、両方の場所に表示されます。 |

タスク 13. クロマトグラムからのスペクトルの抽出（LC/MS と LC/MS/MS）（続き）

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
| --- | --- | --- |

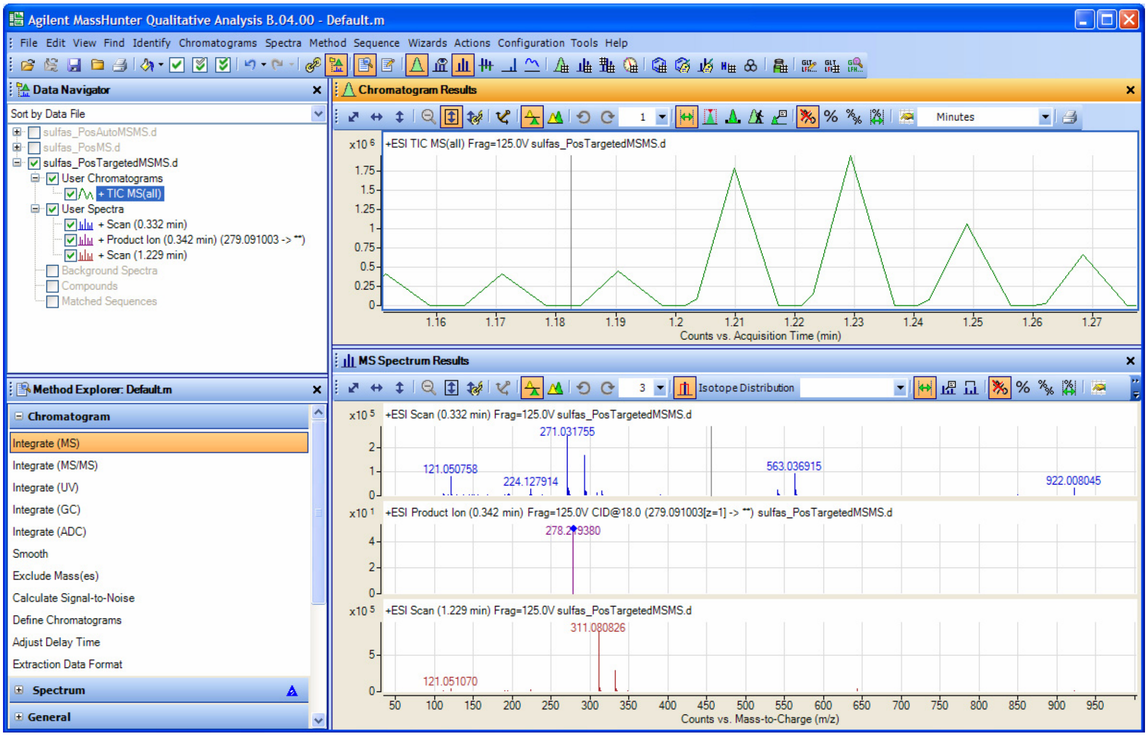



図 28 最初のピークの MS スキャンとプロダクトイオンスペクトル、および最後のピークの MS スキャンスペクトルが表示された定性分析プログラム

タスク 13. クロマトグラムからのスペクトルの抽出（LC/MS と LC/MS/MS）（続き）

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|
| **3** **sulfas_PosTargetedMSMS.d** データファイルの最後のピークのプロダクトイオンスペクトルを抽出します。<br>• ［スペクトルプレビュー］ウィンドウを表示します。<br>• リテンションタイム 1.237 分の谷からスペクトルを抽出します。<br>• このスペクトルを User Spectra フォルダにコピーします。<br>• 表示を変更し、4 つのスペクトルを表示します。<br>• ［スペクトルプレビュー］をオフにします。 | **a** メインツールバーの［**スペクトルプレビュー**］アイコン をクリックします。<br>**b** 1.23 分近辺の谷で、スペクトルを抽出します。<br>**c** ［スペクトルプレビュー］ウィンドウでスペクトルを右クリックし［**ユーザースペクトルにコピー**］をクリックします。<br>**d** ［MS スペクトル結果］ウィンドウの［**リストペインの最大数**］で 4 を選択します。<br>**e** ［スペクトルプレビュー］ウィンドウを閉じます。 | • ［スペクトルプレビュー］が有効な場合、手動で選択したスペクトルは［データナビゲータ］の［ユーザースペクトル］セクションではなく、［スペクトルプレビュー］ウィンドウに表示されます。<br>• ［スペクトルプレビュー］ウィンドウが開いている場合、新しいスペクトルを抽出すると、定性分析が前のスペクトルを上書きします。<br>• クロマトグラムのスペクトルを素早くレビューしたり、保存するスペクトルが少ない場合は［スペクトルプレビュー］モードが便利です。 |

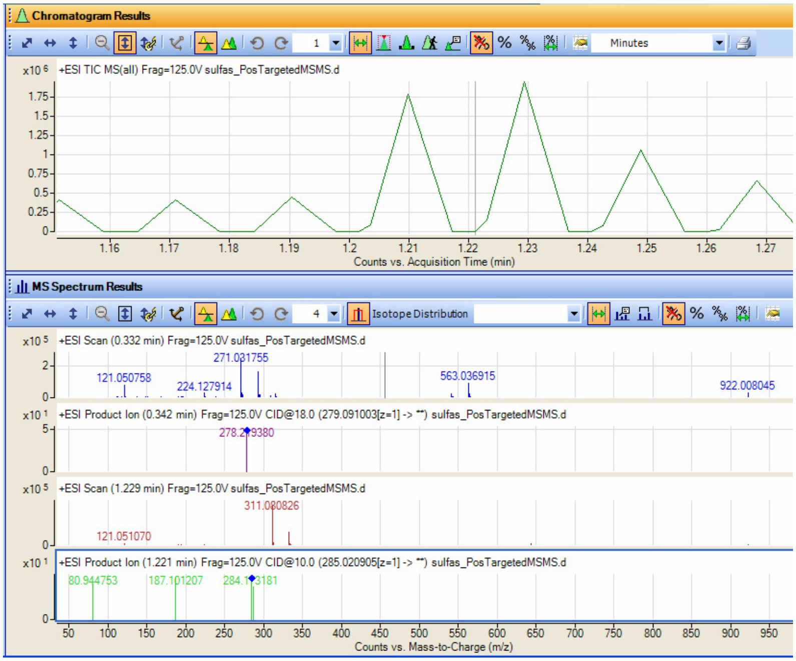



**図 29**　クロマトグラムの最後のピークのプロダクトイオンスペクトルを表示した［クロマトグラム結果］および［MS スペクトル結果］ウィンドウ

タスク 13. クロマトグラムからのスペクトルの抽出（LC/MS と LC/MS/MS）（続き）

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
| --- | --- | --- |
| **4** **sulfas_PosTargeted.d** データファイルで、最後のピークの指定範囲内のすべてのポイントを平均したスペクトルを抽出します。<br>• ズームを解除します。<br>• ［クロマトグラム］ツールバーの［範囲選択］アイコンを使用します。<br>• 範囲をピーク全体に設定します。<br>• 記載されたオプションを用いてスペクトルを抽出します。 | **a** ［クロマトグラム結果］ツールバーの［**X 軸と Y 軸のオートスケール**］アイコン をクリックし、完全にズーム解除します。<br>**b** ［クロマトグラム］ツールバーの［**範囲選択**］アイコン をクリックします。<br>**c** 最後のピークの約 1.21 分をクリックし、右の約 1.229 分の上にドラッグします。<br>**d** 右記のオプションのいずれかを用いて、平均スペクトルを抽出します。<br>**e** ［リストペインの最大数］アイコンの隣の下矢印をクリックし、**2** を選択します。 | • クロマトグラム内の選択範囲をダブルクリックすると、平均スペクトルを抽出できます。<br>• あるいは、クロマトグラム内を右クリックし、ショートカットメニューから［**MS スペクトルの抽出**］をクリックします。その後、［**抽出**］をクリックします。<br>• 平均MSスペクトルと平均MS/MSスペクトルの両方が表示されます。 |

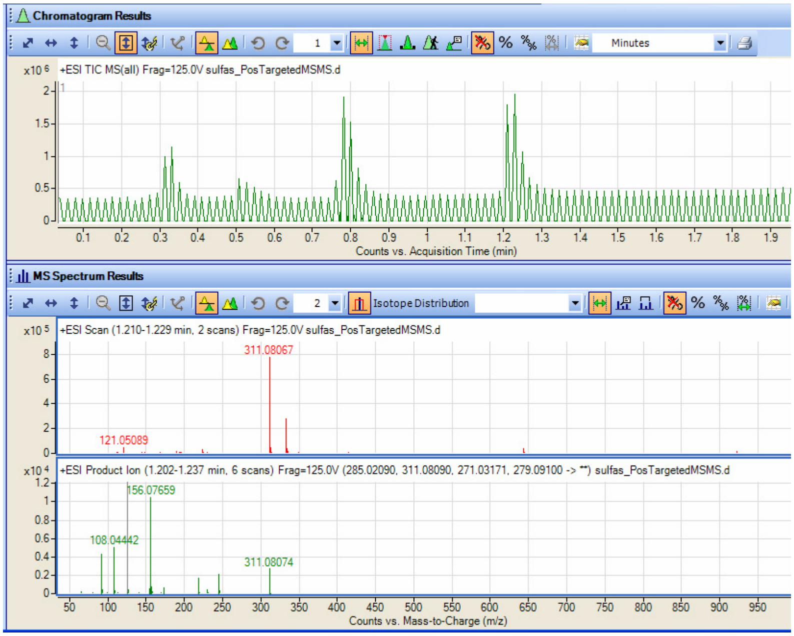



**図 30**　最後のピークの選択範囲から抽出した平均スペクトル

タスク 13. クロマトグラムからのスペクトルの抽出（LC/MS と LC/MS/MS）（続き）

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|
| **5** **sulfas_PosTargeted.d** データファイルのピーク 1 と 4 の範囲を一緒に平均したスペクトルを抽出します。<br>• ヒント：［範囲選択］アイコンと〈Ctrl〉キーを用いて、まずひとつめのピークの範囲を選択します。<br>• 右記のいずれかのオプションを用いて、スペクトルを抽出します。 | **a** 〈Ctrl〉キーを押したままにします。<br>**b** 最初のピーク左側の約 0.3 分をクリックし、右側の約 0.33 分の上にドラッグし、マウスを離します。<br>**c** 〈Ctrl〉キーを離します。<br>**d** 以下オプションまたは右記のオプションのいずれかを用いて、平均スペクトルを抽出します。<br>• いずれかのピークの選択範囲内をダブルクリックします。 | • 2 番目のピークはステップ 4 で既に範囲が選択されています。<br>• スペクトルを抽出するために、クロマトグラム内を右クリックし［**MS スペクトルの抽出**］をクリックすることもできます。［スペクトルの抽出］ダイアログボックスが表示されます。［**抽出**］をクリックします。<br>• 選択範囲が青色で表示されます。この範囲を使用すると、実際に使用された範囲の表示は、青色から灰色に変わります。 |

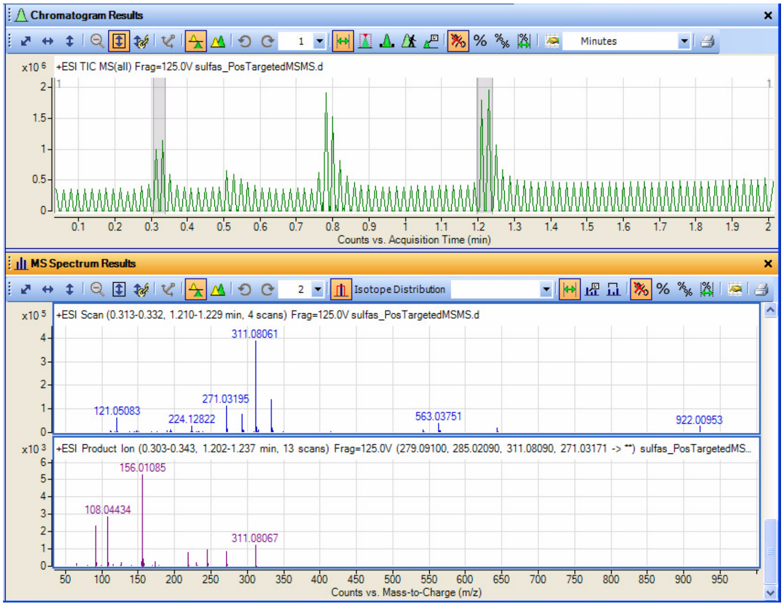



**図 31**　複数の範囲から作成された平均 MS と MS/MS スペクトル

タスク 13. クロマトグラムからのスペクトルの抽出（LC/MS と LC/MS/MS）（続き）

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
| --- | --- | --- |
| **6** **sulfas_PosTargetedMSMS.d** から抽出された MS/MS TIC のピークスペクトルを抽出する際、バックグラウンドスペクトルを減算します。<br>• ［データナビゲータ］の［ユーザースペクトル］にあるスキャンをすべて削除します。<br>• ピークの開始とピークの終了のスペクトルの平均であるバックグラウンドスペクトルを抽出します。<br>• 積分したピークのピークスペクトルを抽出します。 | **a** ［データナビゲータ］の［**ユーザースペクトル**］にあるスペクトルを右クリックし、［**削除**］をクリックします。<br>**b** ［削除］メッセージボックスで［**はい**］をクリックします。<br>**c** イオン 279.09100 の積分された MS/MS EIC を 100 ～ 300 の m/z 範囲で抽出します（42 ページの「タスク 11. クロマトグラムの抽出（LC/MS と LC/MS/MS）」を参照）。<br>**d** ［メソッドエクスプローラ］で［**スペクトル**］>［**抽出 (MS/MS)**］を選択します。<br>**e** ［**ピークスペクトル抽出 (MS/MS)**］タブをクリックします。<br>**f** ［**ピークスペクトルバックグラウンド**］で［**ピーク開始点と終了点のスペクトルの平均**］をクリックします。<br>**g** ［クロマトグラム結果］ツールバーの［**ピーク選択**］アイコンをクリックします。<br>**h** 0.8 分のピークを選択します。<br>**i** 右クリックし［**ピークスペクトルの抽出**］をクリックします。 | • この処理の最後に、抽出したピークスペクトルすべてに対して、指定したバックグラウンドスペクトルが自動的に減算されることを確認してください。 |

タスク 13. クロマトグラムからのスペクトルの抽出（LC/MS と LC/MS/MS）（続き）

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
| --- | --- | --- |

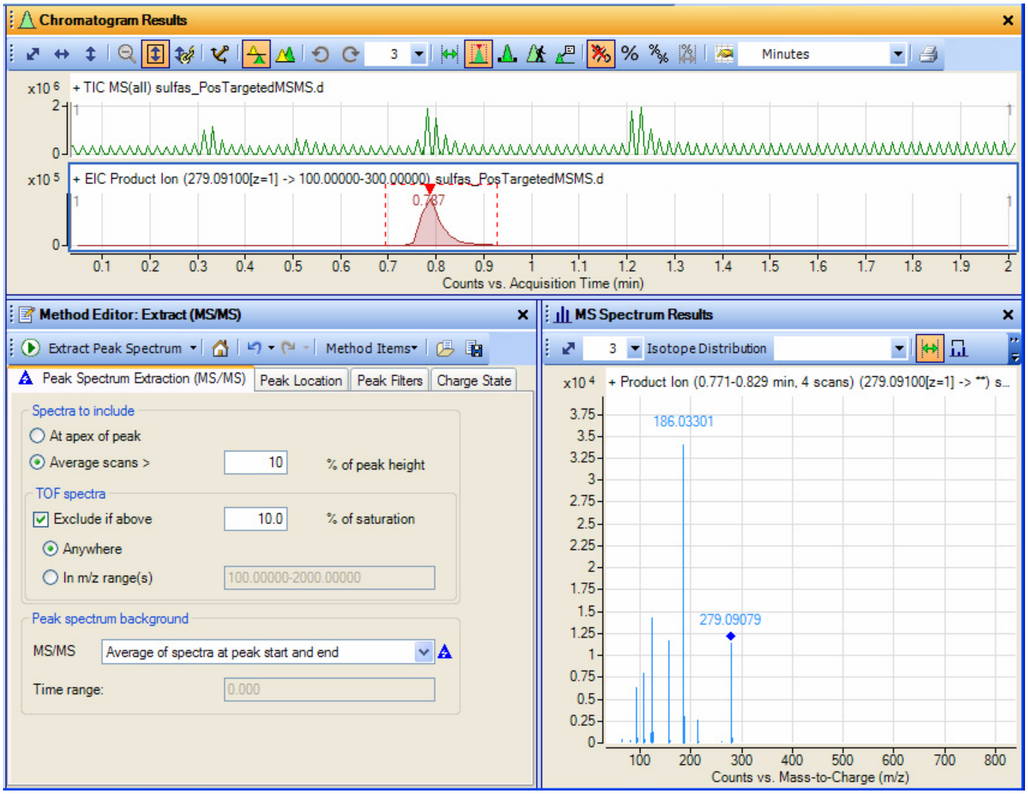



**図 32**　バックグラウンド減算されたプロダクトイオン（MS/MS）スペクトル

タスク 13. クロマトグラムからのスペクトルの抽出（LC/MS と LC/MS/MS）（続き）

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|
| 7　プロダクトイオン 186.03396 および 156.07760 を指定する MS/MS EIC プロダクトイオンクロマトグラムを抽出します。<br>• クロマトグラムの抽出時に積分を実行しないでください。 | **a**　プロダクトイオンスペクトルを右クリックします。<br>**b**　[**クロマトグラムの抽出**] をクリックします。<br>**c**　[**タイプ**] リストで [**EIC**] を選択します。<br>**d**　[**抽出時に積分**] チェックボックスをオフにします。<br>**e**　[**MS レベル**] リストから [**MS/MS**] を選択します。<br>**f**　[**プリカーサイオン m/z**] で [**任意**] を選択します。<br>**g**　m/z 値のボックスに `186.03396, 156.07760` を入力します。<br>**h**　[ **複数の質量を 1 つのクロマトグラムにマージ** ] チェックボックスをオンにします。<br>**i**　[**OK**] をクリックします。 | • 複数の m/z 値を指定する場合、カンマ区切りで入力します。<br>• 単一の m/z 値を入力した場合その値は [詳細] タブで設定されている [**このクロマトグラムの m/z の範囲**] パラメータにより、自動的に範囲へ変換されます。 |

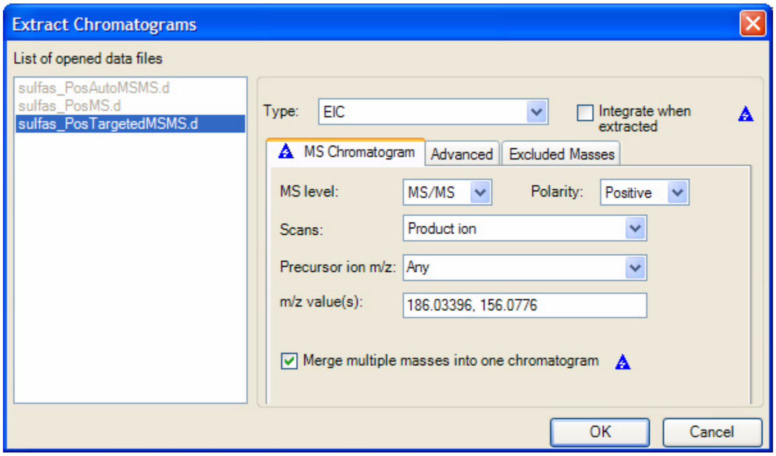



**図 33**　プロダクトイオン EIC に対する［クロマトグラムの抽出］ダイアログボックス

タスク 13. クロマトグラムからのスペクトルの抽出（LC/MS と LC/MS/MS）（続き）

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|

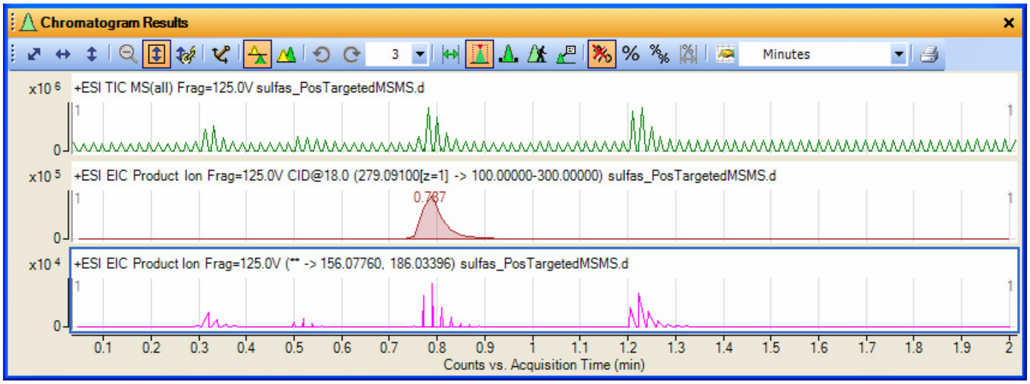



図 34　プロダクトイオン EIC

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|
| **8** ステップ 6 のプロダクトイオンスペクトル、279.091-> ** を使用して MS/MS EIC を抽出します。 | **a** ［MS スペクトル結果］ウィンドウで、ピーク 279.09079 付近の範囲を選択します。<br>**b** 〈**Ctrl**〉キーを押したままにします。<br>**c** ピーク 186.03301 付近の範囲を選択します。<br>**d** スペクトルを右クリックし［**EIC の抽出**］>［**選択範囲**］をクリックします。 | • スペクトルの各範囲に、別々のクロマトグラムが抽出されます。<br>• プロダクトイオン範囲が、[MS スペクトル結果］ウィンドウで選択した範囲に設定されます。 |

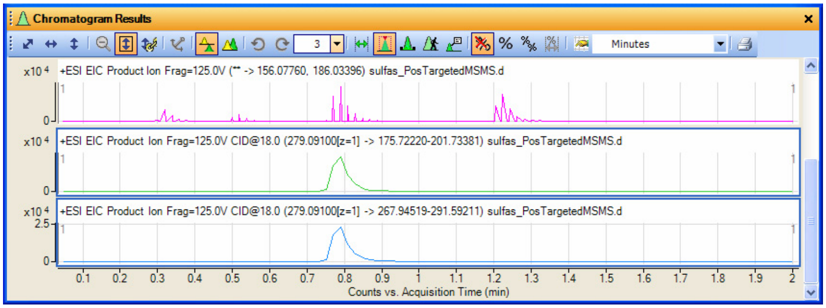



図 35　プロダクトイオンスペクトルから直接作成したプロダクトイオン EIC

# MS データと UV データのタスク

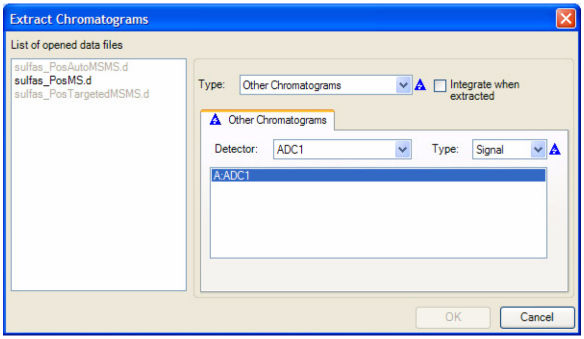
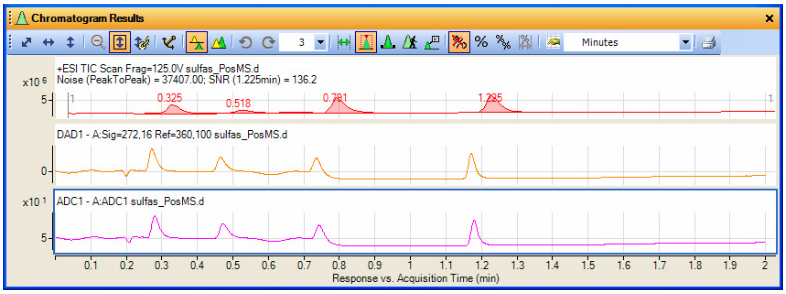
## タスク 14. クロマトグラムの抽出（MS と UV）

このタスクでは、MS と UV のクロマトグラムをデータファイルから抽出します。

タスク 14. クロマトグラムの抽出（MS と UV）

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|
| 1 UV クロマトグラム（DAD1 と ADC1）を **sulfas_PosMS.d** データファイルから抽出します。<br>• sulfas_PosMS.d 以外のすべてのデータファイルを非表示にします。<br>• TIC スキャンのクロマトグラムを除き、すべてのクロマトグラムを削除します。<br>• DAD1 クロマトグラムを抽出します。<br>• ADC1 クロマトグラムを抽出します。<br>• 表示されるペインの数を3に変更します。 | **a** ［データナビゲータ］ウィンドウで、**sulfas_PosMS.d** 以外のデータファイルのチェックボックスをオフにします。<br>**b** sulfas_PosMS.dデータファイルのチェックボックスをオンにします。<br>**c** **TIC スキャンのクロマトグラムを除き、すべてのクロマトグラムを削除します。**<br>**d** 下記オプションまたは右のオプションのいずれかを用いて［クロマトグラムの抽出］ダイアログボックスを表示します。<br>• **［クロマトグラム］＞［クロマトグラムの抽出］**をクリックします。<br>**e** **開いているデータファイルのリストで、sulfas-PosMS.d** をクリックします。<br>**f** **［タイプ］**リストで **［その他のクロマトグラム］**をクリックします。<br>**g** **［検出器］**リストから［DAD1］を選択します。<br>**h** **［OK］**をクリックします。<br>**i** ［クロマトグラムの抽出］ダイアログボックスを開きます。<br>**j** **開いているデータファイルのリストで、sulfas-PosMS.d** をクリックします。<br>**k** **［タイプ］**リストで **［その他のクロマトグラム］**を選択します。<br>**l** **［検出器］**リストから［ADC1］を選択します。<br>**m** **［OK］**をクリックします。<br>**n** ［クロマトグラム結果］ツールバーで **［リストペインの最大数］**が 3 に設定されていることを確認します。 | • 以下の方法でもクロマトグラムを抽出できます。<br>• クロマトグラムを右クリックし、**［クロマトグラムの抽出］**をクリックします。<br>• ［データナビゲータ］ウィンドウで、**sulfas_PosMS.d** の **［TIC スキャン］**をハイライトします。次に **［TIC スキャン］**を右クリックし、**［クロマトグラムの抽出］**をクリックします。<br>• 抽出後、抽出したクロマトグラムを自動的に積分するように選択することもできます。 |

タスク 14. クロマトグラムの抽出（MS と UV）（続き）

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|
| | <br><br>図 36 ［クロマトグラムの抽出］ダイアログボックス［その他のクロマトグラム］タイプ | |
| | <br><br>図 37 DAD1、ADC1、元の TIC を表示した［クロマトグラム結果］ウィンドウ | |

# タスク 15. クロマトグラムの積分（UV）とシステム適合性値の計算（MS と UV）

このタスクでは、クロマトグラムを積分する方法、積分パラメータを変更して結果を変更する方法、各ピークのシグナル / ノイズ比を表示するさまざまな方法を学習します。システム適合性の計算結果を有効にする方法も学習します。

タスク 15. クロマトグラムの積分（MS と UV）

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
| --- | --- | --- |
| **1** 右のオプションのいずれかを用いて、**sulfas_PosMS.d** UV クロマトグラムを積分します。<br>• DAD1 と ADC1 のクロマトグラムをハイライトします。<br>• クロマトグラムを積分します。 | **a** DAD1 と ADC1 のクロマトグラムをハイライトします。<br>**b** 以下のオプションのいずれかを用いて、**sulfas_PosMS.d** UV クロマトグラムを積分します。<br>• メインメニューから［**クロマトグラム**］>［**クロマトグラムの積分**］をクリックします。<br>• クロマトグラムをハイライトします。次に、クロマトグラムを右クリックし［**クロマトグラムの積分**］をクリックします。<br>• ［データナビゲータ］で、**sulfas_PosMS.d** >［**ユーザークロマトグラム**］セクションの **DAD1** と **ADC1** を強調表示します。次に、いずれかのクロマトグラムを右クリックし、［**クロマトグラムの積分**］をクリックします。 | • 積分では、default.m メソッドで選択されている［一般］積分方式（インテグレータ）が使用されます。［クロマトグラム］>［積分 (UV)］>［積分］タブで、この値を変更できます。<br>• ［クロマトグラム］>［積分（UV)］セクションが使用できない場合は、［ユーザーインターフェイスコンフィグレーション］ダイアログボックスの［UV］チェックボックスをオンにする必要があります。<br>• デフォルトパラメータを用いた積分では非常に小さなピークも検出されることに注意してください。 |

## タスク 15. クロマトグラムの積分（MS と UV）（続き）

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|

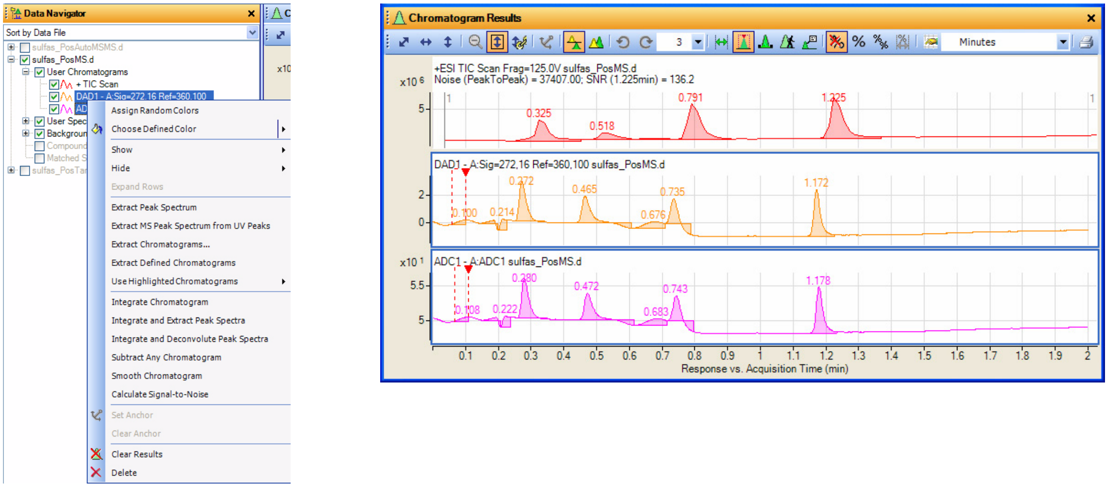



図 38 ［データナビゲータ］のショートカットメニューの 1 つと、積分された sulfas_PosMS.d TIC クロマトグラム

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|
| 2 UV クロマトグラムのシステム適合性の計算結果を有効にします。 | a ［メソッドエクスプローラ］から［**クロマトグラム**］>［**積分 (UV)**］を選択し、［積分］タブを表示します。<br>b ［**適合性**］タブをクリックします。<br>c ［**システム適合性の計算結果を有効にする**］をオンにします。<br>d ［**米国薬局方 (USP)**］を選択します。<br>e ［カラム空隙時間］ボックスに、0.15 を入力します。<br>f ［カラム長さ］ボックスに、5 を入力します。 | • 現在のメソッドに保存されている値から設定を変更すると、青色三角形が表示されます。メソッドを保存すると、三角形は消えます。<br>• 選択している薬局方によって、アルゴリズムで計算される［積分ピークリスト］列が異なります。詳細は、オンラインヘルプを参照してください。 |

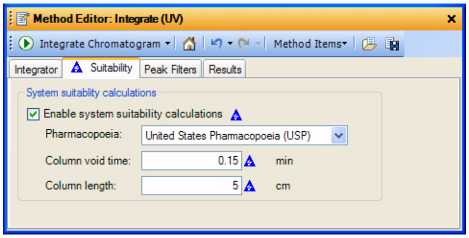
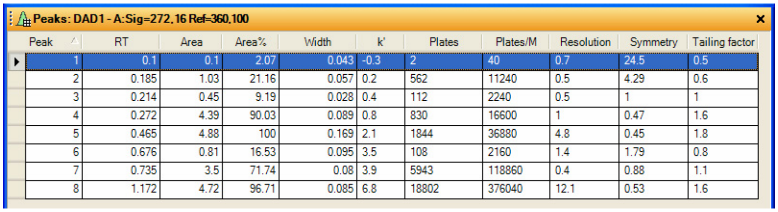



図 39 ［クロマトグラム］>［積分 (UV)］の［適合性］タブ

タスク 15. クロマトグラムの積分（MS と UV）（続き）

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|
| **3** クロマトグラムを再積分します。 | • ［メソッドエディタ］ツールバーの **［クロマトグラムの積分］**アイコン をクリックし、新しい設定を用いて積分します。 | |
| **4** システム適合性の計算結果を表示します。<br>• ［積分ピークリスト］ウィンドウを開きます。<br>• ノイズ範囲の値をレビューし、積分したピークのシグナル/ノイズ比を計算します。 | **a** **［表示］>［積分ピークリスト］**をクリックします。<br>**b** ［積分ピークリスト］ウィンドウのヘッダーを右クリックし **［Floating］**をクリックします。<br>**c** 表示しない列の列ヘッダーを右クリックし **［列の削除］**をクリックします。<br>**d** 任意の列ヘッダーを右クリックし **［列の追加 / 削除］**をクリックして表示する列を変更します。 | • システム適合性の計算結果が［積分ピークリスト］テーブルに含まれるようになります。<br>• 適合性の値は［k'］、［テーリングファクタ］、［プレート］、［理論段数/m］、［対称度］などがあります。<br>• システム適合性の計算結果は、MS、MS/MS、GC クロマトグラムでも有効にすることができます。 |



Peaks: DAD1 - A:Sig=272,16 Ref=360,100

| Peak | RT | Area | Area% | Width | k' | Plates | Plates/M | Resolution | Symmetry | Tailing factor |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 1 | 0.1 | 0.1 | 2.07 | 0.043 | -0.3 | 2 | 40 | 0.7 | 24.5 | 0.5 |
| 2 | 0.185 | 1.03 | 21.16 | 0.057 | 0.2 | 562 | 11240 | 0.5 | 4.29 | 0.6 |
| 3 | 0.214 | 0.45 | 9.19 | 0.028 | 0.4 | 112 | 2240 | 0.5 | 1 | 1 |
| 4 | 0.272 | 4.39 | 90.03 | 0.089 | 0.8 | 830 | 16600 | 1 | 0.47 | 1.6 |
| 5 | 0.465 | 4.88 | 100 | 0.169 | 2.1 | 1844 | 36880 | 4.8 | 0.45 | 1.8 |
| 6 | 0.676 | 0.81 | 16.53 | 0.095 | 3.5 | 108 | 2160 | 1.4 | 1.79 | 0.8 |
| 7 | 0.735 | 3.5 | 71.74 | 0.08 | 3.9 | 5943 | 118860 | 0.4 | 0.88 | 1.1 |
| 8 | 1.172 | 4.72 | 96.71 | 0.085 | 6.8 | 18802 | 376040 | 12.1 | 0.53 | 1.6 |

**図 40**　システム適合性の値を表示した積分ピークテーブル

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|
| **5** デフォルトメソッドの設定を復元し、［メソッドエディタ］と［積分ピークリスト］のウィンドウを閉じます。 | **a** 変更をキャンセルし、デフォルトメソッドから値を復元するには［メソッドエディタ］ツールバーの **［最後に保存したファイルの値に復元］**アイコン をクリックします。<br>**b** **［メソッドエディタ］**を閉じます。<br>**c** ［積分ピークリスト］ウィンドウのヘッダーを右クリックし **［Floating］**をクリックします。<br>**d** **［表示］>［積分ピークリスト］**をクリックします。 | • ショートカットメニューから［Floating］コマンドをもう一度クリックすると、［積分ピークリスト］ウィンドウが元の位置にドッキングします。 |

# タスク 16. クロマトグラムからのスペクトルの抽出（UV）

このタスクでは、クロマトグラムで指定したスペクトルを抽出します。定性分析プログラムでは、特定のデータポイントから UV スペクトルを抽出したり、複数のデータポイントまたは範囲の平均から平均 UV スペクトルを抽出したり、あるいはピークスペクトルを抽出することができます。

タスク 16. クロマトグラムからのスペクトルの抽出（UV）

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
| --- | --- | --- |
| **1** **sulfas_PosMS.d** データファイルの 0.27 分のピークと最後のピーク（1.22 分）の特定のデータポイントのスペクトルを抽出します。<br>• ADC1 クロマトグラムを削除します。<br>• 0.17 〜 0.31 分の範囲を拡大した後、以下のコメントで説明するオプションのいずれかを用いて、0.27 分近辺のピークからスペクトルを抽出します。<br>• [スペクトルプレビュー] を開きます。<br>• 1.1 〜 1.3 分の範囲を拡大した後、1.17 分近辺ピークからスペクトルを抽出します。<br>• このスペクトルを[ユーザースペクトル]セクションにコピーします。<br>• 表示を変更し、2 つ以上のスペクトルを表示します。 | **a** ADC1 クロマトグラムを削除します。<br>**b** [クロマトグラム結果] ツールバーの **[X 軸と Y 軸のオートスケール]** アイコン をクリックし、完全にズーム解除します。<br>**c** [クロマトグラム結果] ツールバーの **[範囲選択]** アイコン をクリックします。<br>**d** DAD1 クロマトグラムをハイライトします。<br>**e** 最初のピークを拡大するには、0.17 分で右クリックし、0.31 分までドラッグした後、離します。<br>**f** 0.27 分近辺のピークで、コメントに記載された方法で UV スペクトルを抽出します。<br>**g** [クロマトグラム結果] ツールバーの **[オートスケール（ズーム解除）]** アイコン をクリックします。<br>**h** [スペクトルプレビュー] を開くには、**[スペクトルプレビュー]** アイコン をクリックします。<br>**i** 1.1 〜 1.3 分の範囲を拡大します。<br>**j** 1.17 分近辺のピークで、UV スペクトルを抽出します。スペクトルは [スペクトルプレビュー] ウィンドウに表示されます。<br>**k** スペクトルを右クリックし **[ユーザースペクトルにコピー]** をクリックします。[スペクトルプレビュー] ウィンドウは [UV スペクトル結果] と同じウィンドウにタブ表示されます。<br>**l** 必要に応じて [UV スペクトル結果] ツールバーの **[リストペインの最大数]** アイコン隣の矢印をクリックし、**2** を選択します。<br>**m** [MS スペクトル結果] ウィンドウを閉じます。 | • ADCクロマトグラムからスペクトルを抽出することはできません。<br>• ズームする場合 [ズーム中に Y 軸をオートスケール] アイコン がオンになっていることを確認します。「オン」の場合、アイコンの背景色はオレンジ色です。<br>• 以下のいずれかの方法でスペクトルを抽出できます。<br>　• クロマトグラムのデータポイントをダブルクリックします。<br>　• クロマトグラムのデータポイントをクリックした後、クロマトグラム内を右クリックします。**[UV スペクトルの抽出]** をクリックします。[スペクトルの抽出] ダイアログボックスが表示されます。**sulfas_PosMS.d** ファイルが選択されていることを確認し **[抽出]** をクリックします。<br>• スペクトルを初めて抽出する場合、[UV スペクトル結果] ウィンドウが表示され、スペクトルが表示されます。[データナビゲータ] の [ユーザースペクトル] の下にそのスペクトルのタイプとリテンションタイムが表示されます。<br>• [スペクトルプレビュー] が有効の場合、手動で選択したスペクトルが表示されますが [ユーザースペクトル] セクションには保存されません。<br>• [スペクトルプレビュー] が開いている場合、新しいスペクトルを抽出すると、前のスペクトルは上書きされます。 |

タスク 16. クロマトグラムからのスペクトルの抽出（UV）（続き）

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|

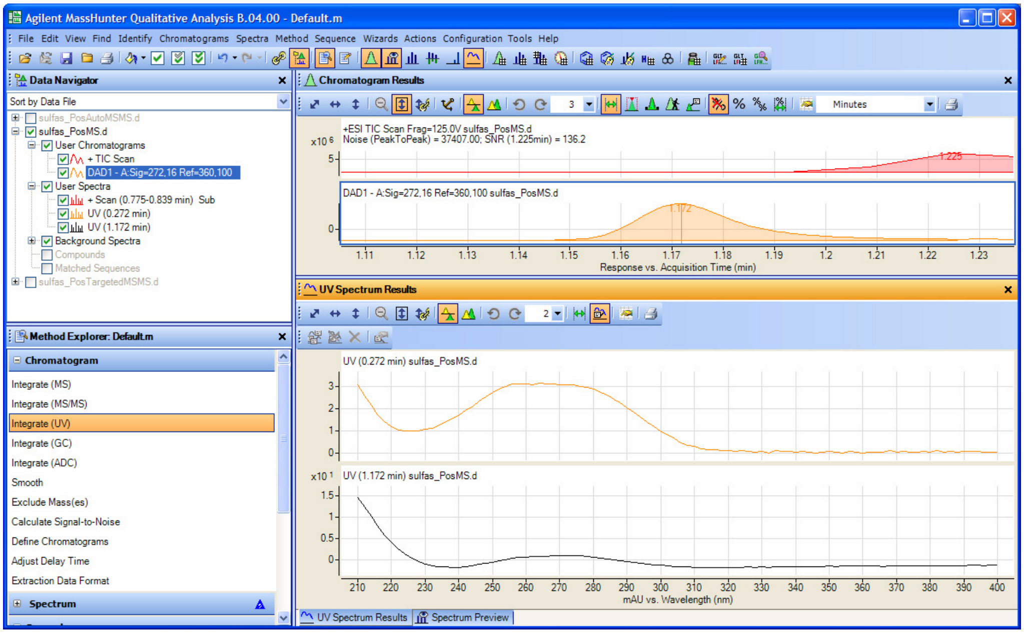



**図 41**　sulfas_PosMS.d ファイルの積分した 2 つのピークから抽出した UV スペクトルを表示するメインウィンドウ

タスク 16. クロマトグラムからのスペクトルの抽出（UV）（続き）

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
| --- | --- | --- |
| **2** **sulfas_PosMS.d** データファイルで、最後の積分 UV ピークの指定範囲内のすべての UV ポイントを平均したスペクトルを抽出します。<br>• 既存の［ユーザースペクトル］すべてを削除します。<br>• クロマトグラムのズームを解除します。<br>• ［スペクトルプレビュー］をオフにします。<br>• ［クロマトグラム］ツールバーの［範囲選択］アイコンを使用します。<br>• 範囲設定でピークを選択します。<br>• 記載されたオプションを用いてスペクトルを抽出します。 | **a** 削除する［ユーザースペクトル］をハイライトします（〈**Ctrl**〉キーを使用）。<br>**b** 選択した［ユーザースペクトル］を右クリックし **［削除］** をクリックします。<br>**c** ［削除］ダイアログボックスが表示される場合 **［はい］** をクリックします。<br>**d** **［X 軸と Y 軸のオートスケール］** アイコン をクリックし、完全にズームを解除します。<br>**e** **［スペクトルプレビュー］** ウィンドウをクリックした後、ウィンドウを閉じます。<br>**f** ［クロマトグラム］ツールバーの **［範囲選択］** アイコン をクリックします。<br>**g** DAD1　クロマトグラムで最後の積分ピークをクリックし、ピークの右側までドラッグします。<br>**h** 下記または右記のオプションを用いて、平均スペクトルを抽出します。<br>• ピークの範囲内で右クリックし、ショートカットメニューから **［UV スペクトルの抽出］** をクリックします。<br>• ［スペクトルの抽出］ダイアログボックスの **［抽出］** をクリックします。 | • クロマトグラムの選択した範囲をダブルクリックしても、平均スペクトルを抽出できます。<br>• ［メッセージボックスオプション］ダイアログボックスから、クロマトグラムを削除するときに、確認を求められるかどうかを変更できます。このダイアログボックスは、**［ツール］** > **［メッセージボックスオプション］** コマンドを使用して表示できます。<br>• 複数のデータファイルが読み込まれている場合に限り、［スペクトルの抽出］ダイアログボックスが表示されます。 |

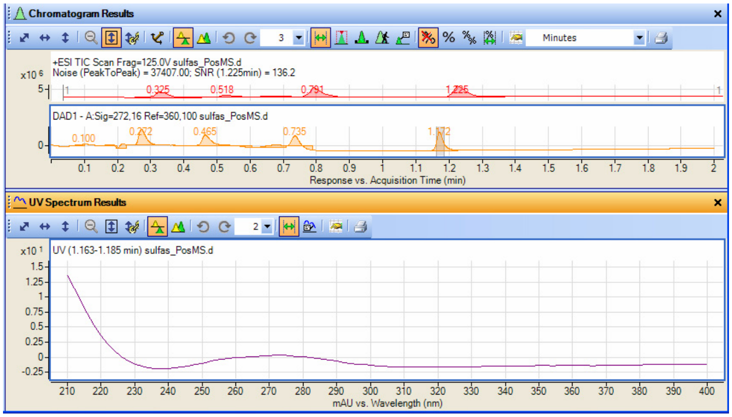



**図 42**　最後のピークの選択範囲から抽出した平均スペクトル

タスク 16. クロマトグラムからのスペクトルの抽出（UV）（続き）

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|
| **3** **sulfas_PosMS.d** の UV ピークスペクトルを抽出します。<br>• ［データナビゲータ］の［ユーザースペクトル］にあるスキャンをすべて削除します。<br>• DAD1 クロマトグラムを積分します。<br>• 3番目の積分ピークのピークスペクトルを抽出します。 | **a** ［データナビゲータ］の［**ユーザースペクトル**］で、削除する［ユーザースペクトル］をハイライトします。<br>**b** スペクトルを右クリックし［**削除**］をクリックします。<br>**c** ［**はい**］をクリックします。<br>**d** DAD1　クロマトグラムをハイライトします。<br>**e** ［**クロマトグラム**］>［**クロマトグラムの積分**］をクリックします。<br>**f** ［クロマトグラム結果］ツールバーの［**ピーク選択**］アイコンをクリックします。<br>**g** DAD1 クロマトグラムの 3 番目の積分ピーク（0.225 分）をクリックします。<br>**h** ピークを右クリックし［**ピークスペクトルの抽出**］をクリックします。 | • 抽出されたピークスペクトルは、［スペクトルプレビュー］ウィンドウが開いている場合でも、常に［UV スペクトル結果］ウィンドウまたは［MS スペクトル結果］ウィンドウに入ります。 |

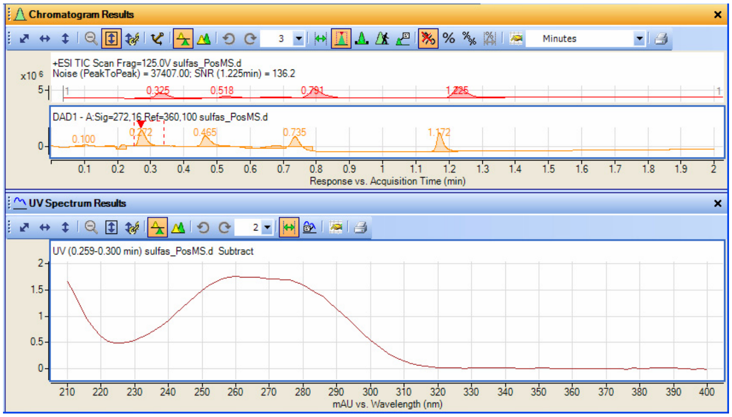



**図 43**　積分された DAD1 クロマトグラムと UV ピークスペクトル

| | | |
|---|---|---|
| **4** 3 つすべてのデータファイルを閉じます。 | **a** ［**ファイル**］>［**すべて閉じる**］をクリックします。<br>**b** 結果の保存を求められたら［**いいえ**］をクリックします。 | |

# GC-MS データのタスク

## タスク 17. GC のユーザーインターフェイスのコンフィグレーション

このタスクでは［一般］ワークフローを使用します。GC/MS データの解析をサポートするのはこのワークフローのみです。［ユーザーインターフェイス コンフィグレーション］ダイアログボックスを開き、GC QQQ システムに適切なチェックボックスをオンにします。

タスク 17. GC のユーザーインターフェイスのコンフィグレーション

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|
| 1 定性分析プログラムを開きます。 | a Agilent MassHunter の［**Qualitative Analysis B.04.00**］アイコン をダブルクリックします。<br>［データファイルを開く］ダイアログボックスが表示されます。<br>b ［データファイルを開く］ダイアログボックスで［**キャンセル**］をクリックします。 | • ウィンドウがアクティブの時に F1 キーを押すと、ウィンドウ、ダイアログボックス、タブに関するヘルプが表示できます。 |
| 2 ［一般］ワークフローに切り替えます。 | a ［**コンフィグレーション**］>［**ワークフローのコンフィグレーション**］>［**一般**］コマンドをクリックします。<br>b ［**ワークフローのデフォルトメソッドを読み込む**］ボタンと［**ワークフローのデフォルトレイアウトを読み込む**］ボタンをクリックします。<br>c ［**OK**］をクリックします。<br>d ［クロマトグラム結果］ツールバーの［**リストモード**］アイコン をクリックします。 | • GC-QQQ データ測定プログラムが同じコンピュータにインストールされている場合、ユーザーインターフェイスはソフトウェアによって自動的にコンフィグレーションされます。<br>• デフォルトでは、クロマトグラムは重ね描きモードになっています。この例ではクロマトグラムは［リストモード］で表示されています。 |

タスク 17. GC のユーザーインターフェイスのコンフィグレーション

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
| --- | --- | --- |
| **3** GC 機能のみを表示するようにユーザーインターフェイスをコンフィグレーションします。 | **a** [コンフィグレーション] > [**ユーザーインターフェイス コンフィグレーション**] をクリックします。<br>**b** [分離タイプ] で [**GC**] チェックボックスのみをオンにします。<br>**c** [イオン化タイプ] で [**EI などの "ハード"イオン化テクニック**]チェックボックスをオンにします。[**CI、APCI、ESI、MALDI などの " ソフト " イオン化テクニック**] チェックボックスをオフにします。<br>**d** [質量精度]で [**精密質量 (TOF、Q-TOF)**] チェックボックスをオフにします。[**ユニットマス(Q、QQQ)**] チェックボックスをオンにします。<br>**e** [オプションのソフトウェア機能] で [**Peptide Sequence Editor**] チェックボックスと [**BioConfirm ソフトウェア**] チェックボックスをオフにします。<br>**f** [非 MS 検出器] で [**UV**] と [**ADC**] のチェックボックスをオフにします。<br>**g** [**詳細パラメータの表示**] チェックボックスをオンにします。<br>**h** [**OK**] をクリックします。 | • 使用可能なコマンドは、[**ユーザーインターフェイス コンフィグレーション**] ダイアログボックスから変更します。<br>• 機能が表示されていない場合、[ユーザーインターフェイス コンフィグレーション] ダイアログボックスでチェックボックスがオフになっている可能性があります。 |

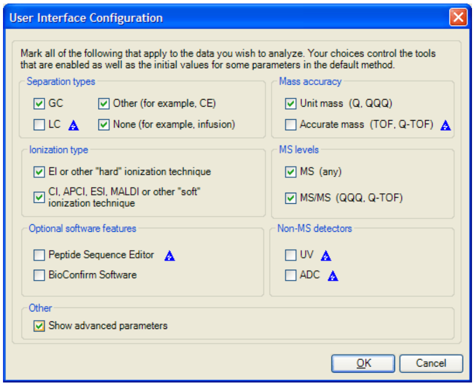



**図 44** GC トリプル四重極のユーザーインターフェイスのコンフィグレーション

# タスク 18. GC/MS データファイルからのクロマトグラムの抽出

このタスクでは、BPC クロマトグラムを GC/MS データファイルから抽出します。また、2 つの GC/MS/MS データファイルから EIC クロマトグラムも抽出します。

タスク 18. GC/MS データファイルからのクロマトグラムの抽出

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
| --- | --- | --- |
| **1** 3 つのデモ GC データファイルを開きます。<br>• **\MassHunter\Data\GC** フォルダ、またはデータファイルをコピーしたフォルダからデータファイル、**Pest - 200 - Scan.D**、**Pest - STD 200 MRM.D**、**Pest Strawb-01 SPIKED 1 ppb - 1 ul inj.D** を開きます。 | **a** ［ファイル］>［すべて閉じる］をクリックします。<br>**b** ［保存］ダイアログボックスで ［**いいえ**］をクリックします。<br>**c** ［**ファイル**］>［**データファイルを開く**］をクリックします。<br>**d** フォルダ **\MassHunter\Data\GC** またはデモファイルを置いたフォルダに移動します。<br>**e** 3 つのデータファイルを選択します。<br>**f** ［**結果データの読み込み**］チェックボックスをオフにします。<br>**g** ［**開く**］をクリックします。 | • まず、読み込まれている他のデータファイルすべてを閉じます。<br>• Pest - 200 -Scan.D ファイルには MS（GC/MS）データが、Pest - STD 200 MRM.D と Pest Strawb-01 SPIKED 1 ppb - 1 ul inj.D ファイルには MS と MS/MS(GC/MS) データが含まれています。<br>• ウィンドウがアクティブの時に F1 キーを押すと、ウィンドウ、ダイアログボックス、タブに関するヘルプが表示できます。 |
| **2** GC データを使用するようにユーザーインターフェイスをコンフィグレーションします。 | • 69 ページの「タスク 17. GC のユーザーインターフェイスのコンフィグレーション」ページを参照します。 | |
| **3** **Pest - 200 - Scan.d** データファイルにある GC/MS データの BPC を抽出します。 | **a** ［データナビゲータ］で **Pest - 200 - Scan.d** のチェックボックスをオンにし、その他のデータファイルのチェックボックスをオフにします。<br>**b** 下記オプションまたは右のオプションのいずれかを用いて［クロマトグラムの抽出］ダイアログボックスを表示します。<br>• ［**クロマトグラム**］>［**クロマトグラムの抽出**］をクリックします。<br>**c** ［**開いているデータファイルのリスト**］で、必要に応じて **Pest - 200 - Scan.d** をクリックします。<br>**d** ［**タイプ**］リストから［**BPC**］を選択します。<br>**e** ［**OK**］をクリックします。 | • 以下の方法でもクロマトグラムを抽出できます。<br>• クロマトグラム内を右クリックし、［**クロマトグラムの抽出**］をクリックします。<br>• ［データナビゲータ］から、［**ユーザークロマトグラム**］セクションでクロマトグラムを 1 つクリックし、右クリックして［**クロマトグラムの抽出**］をクリックします。<br>• マススペクトルからクロマトグラムを抽出することもできます。 |

タスク 18. GC/MS データファイルからのクロマトグラムの抽出 （続き）

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|

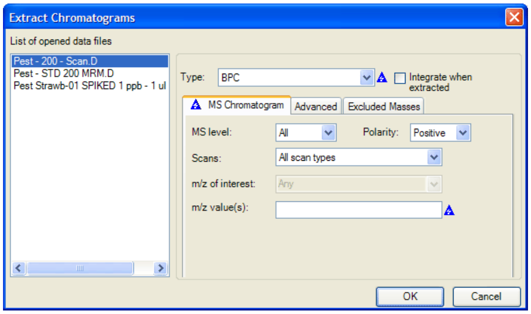



**図 45** ［クロマトグラムの抽出］ダイアログボックス

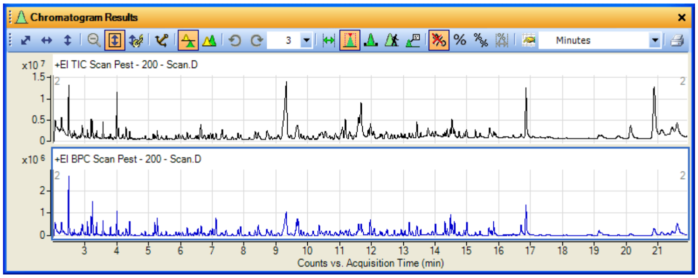



**図 46** GC/MS データファイルの TIC と BPC

タスク 18. GC/MS データファイルからのクロマトグラムの抽出 （続き）

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
| --- | --- | --- |
| **4** MS/MS データファイルから 160 -> 133 の EIC を抽出します。<br>• 今回は抽出したクロマトグラムの積分を選択します。 | **a** ［データナビゲータ］で、**Pest - STD 200 MRM.d** と **Pest Strawb-01 SPIKED 1 ppb - 1 ul inj.D** のチェックボックスをオンにし、**Pest - 200 - Scan.d** のチェックボックスをオフにします。<br>**b** 以下の手順で［クロマトグラムの抽出］ダイアログボックスを開きます。<br>• **［クロマトグラム］>［クロマトグラムの抽出］**をクリックします。<br>**c** **［開いているデータファイルのリスト］**で、必要に応じて **Pest - STD 200 MRM.d** と **Pest Strawb-01 SPIKED 1 ppb - 1 ul inj.D** をクリックします。<br>**d** **［タイプ］**リストから**［EIC］**を選択します。<br>**e** **［MS レベル］**リストから**［MS/MS］**を選択します。<br>**f** ［スキャン］リストから**［MRM］**を選択します。<br>**g** **［プリカーサイオン m/z］**で、160 を選択します。<br>**h** **［m/z 値］**ボックスに、`133` を入力します。<br>**i** **［抽出時に積分］**チェックボックスをオンにします。<br>**j** **［サイクル合計を実行］**と**［複数の質量を 1 つのクロマトグラムに重ね描き］**のチェックボックスをオフにします。<br>**k** **［OK］**をクリックします。 | • 最初に EIC を選択すると、赤いエラー警告アイコンが［m/z 値］テキストボックスの横に表示されます。 このエラーアイコンは、*m/z* 値を入力すると削除されます。<br>• ［m/z 値］テキストボックスには、範囲を入力することも（`100 - 300` など）、複数の値（`133, 139` など）を入力することもできます。<br>• 単一の m/z 値を入力した場合、その値は［詳細］タブのパラメータにより、自動的に範囲へ変換されます。 |

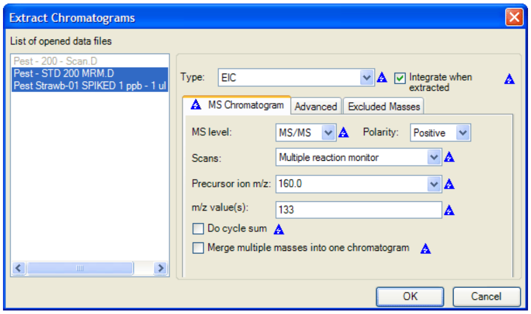
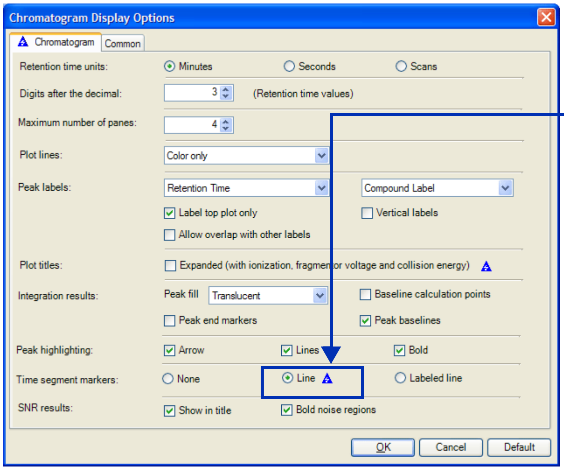



**図 47**　［クロマトグラムの抽出］ダイアログボックス

タスク 18. GC/MS データファイルからのクロマトグラムの抽出 （続き）

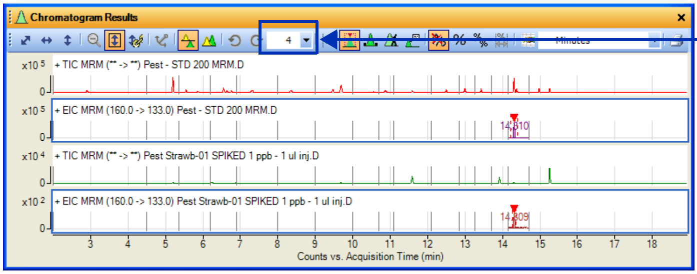
| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|
| 5 ［タイムセグメントマーカー］にラベルを付けないようにプロット表示オプションを変更します。 | a ［**コンフィグレーション**］>［**クロマトグラムの表示オプション**］をクリックします。<br>b ［**タイムセグメントマーカー**］の［**線**］をクリックします。<br>c ［**展開済み**］チェックボックスをオフにします。<br>d ［**OK**］ボタンをクリックします。 | • このダイアログボックスの値を変更することにより、クロマトグラムの表示方法をカスタマイズすることができます。 |




デモデータファイルには多数のタイムセグメントがあります。［タイムセグメントマーカー］からラベルを削除するには、［線］ボタンをクリックします。

**図 48**　［クロマトグラムの表示オプション］ダイアログボックス

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|
| 6 MS/MS データファイルから 4 つのクロマトグラムすべてを同時に表示します。 | • ［クロマトグラム結果］ツールバーの［**リストペインの最大数**］ボックスで **4** を選択します。 | |




［リストペインの最大数］ボックス

2 つの EIC MRM クロマトグラムは、抽出時に積分されます。

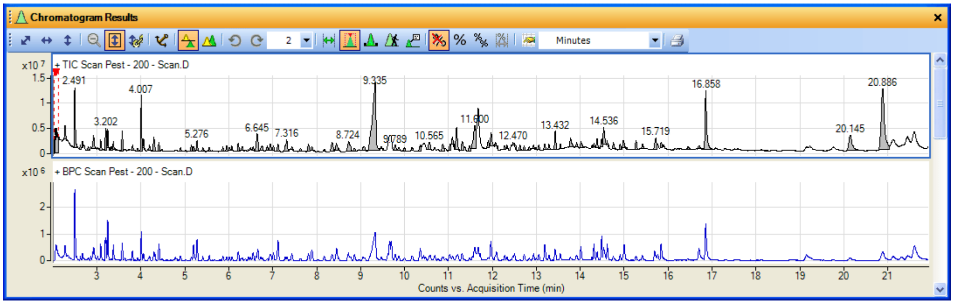
**図 49**　MS/MS データファイルの TIC MRM クロマトグラムと EIC MRM クロマトグラム

# タスク 19. GC/MS クロマトグラムの積分

このタスクでは MS/MS データを使用してクロマトグラムを積分する方法､積分パラメータを変更して結果を変更する方法、そして積分したピークの S/N 比を計算するさまざまな方法を学習します。

タスク 19. クロマトグラムの積分（GC/MS）

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|
| 1 右記のいずれかのオプションを用いて **Pest - 200 - Scan.d** データファイルの TIC スキャンクロマトグラムを積分します。 | a ［データナビゲータ］ウィンドウで Pest - 200 - Scan.D をオンにします。<br>b TIC スキャンクロマトグラムをハイライトし、次のコマンドのいずれかを使用します。<br>• メニューバーから［**クロマトグラム**］>［**クロマトグラムの積分**］をクリックします。<br>• ［クロマトグラム］ウィンドウ内を右クリックし［**クロマトグラムの積分**］をクリックします。<br>• ［データナビゲータ］ウィンドウで、**sulfas_PosTargetedMSMS.d** > ［**ユーザークロマトグラム**］>［**TIC スキャン**］を選択し、［TIC スキャン］を右クリックして［**クロマトグラムの積分**］をクリックします。 | • クロマトグラムのすべてのピークが積分されたことを確認してください。<br>• MS データ、MS/MS データ、UV データ、ADC データに使用する積分を［メソッドエディタ］ウィンドウで選択します。<br>• このクロマトグラムは MS クロマトグラムなので、メソッドエディタの［積分 (MS)］セクションに設定されている値がこのクロマトグラムの積分に使用されます。 |
| 2 同時に 2 つのクロマトグラムしか表示しないようにします。 | • ［クロマトグラム結果］ツールバーの［**リストペインの最大数**］ボックスで **2** を選択します。 | |




多数の小さいピークが積分されます。

**図 50** 多数の小さいピークも積分された TIC スキャンクロマトグラム

タスク 19. クロマトグラムの積分（GC/MS）（続き）

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|
| **3** スレッショルドを変更し、積分するピークを減らします。<br>• スレッショルドを変更し、3 つの最大ピークのみ積分されるようにします。 | **a** ［メソッドエクスプローラ］ウィンドウから **［クロマトグラム］ > ［積分 (MS)］** をクリックし、［積分 (MS)］タブを表示します。<br>**b** **［ピークフィルタ］** タブをクリックします。<br>**c** ［ピークの最大数］セクションで **［ピーク数を高さベースで制限する］** をオンにして、3 を入力します。 | • 現在のメソッドに保存されている値から設定を変更すると、青色三角形が表示されます。メソッドを保存すると、三角形は消えます。 |

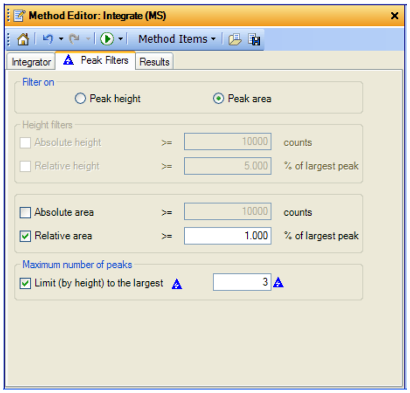



**図 51** ［ピーク数を高さベースで制限する］がオンの状態の［ピークフィルタ］タブ

| | | |
|---|---|---|
| **4** クロマトグラムを再積分します。 | **d** ［メソッドエディタ］ツールバーの ボタンをクリックし、新しい設定を用いて積分します。 | • これで、3 つの最大ピークのみが積分されます。 |

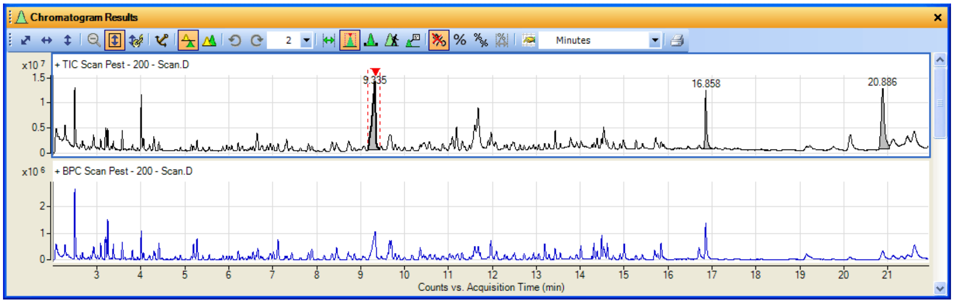



**図 52** ピーク数を制限して積分した TIC スキャンクロマトグラム

タスク 19. クロマトグラムの積分（GC/MS）（続き）

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|
| **5** **Pest - STD 200 MRM.D** データファイルの TIC MRM および EIC MRM クロマトグラムを積分します。 | **a** ［データナビゲータ］ウィンドウで、Pest - STD 200 MRM.d データファイルの **TIC MRM** を選択します。**〈Ctrl〉** キーを押しながら、**EIC MRM** クロマトグラムをクリックします。<br>**b** クロマトグラムを積分するには、次のコマンドのいずれかを使用します。<br>• メニューバーから ［**クロマトグラム**］> ［**クロマトグラムの積分**］を クリックします。<br>• ［クロマトグラム］ウィンドウ内を右クリックし ［**クロマトグラムの積分**］ をクリックします。<br>• ［データナビゲータ］ ウィンドウで、ハイライトされたクロマトグラムを右クリックし ［**クロマトグラムの積分**］ をクリックします。 | • ［データナビゲータ］ウィンドウで複数のクロマトグラムをハイライトするには **〈Ctrl〉** キーを押します。<br>• クロマトグラムのすべてのピークが積分されたことを確認してください。<br>• これらのクロマトグラムは MS/MS クロマトグラムなので、メソッドエディタの[積分(MS/MS)]セクションに設定されている値がこのクロマトグラムの積分に使用されます。MS クロマトグラムの積分にインテグレータを1つ選択し、MS/MS クロマトグラムの積分には別のインテグレータを選択することができます。 |

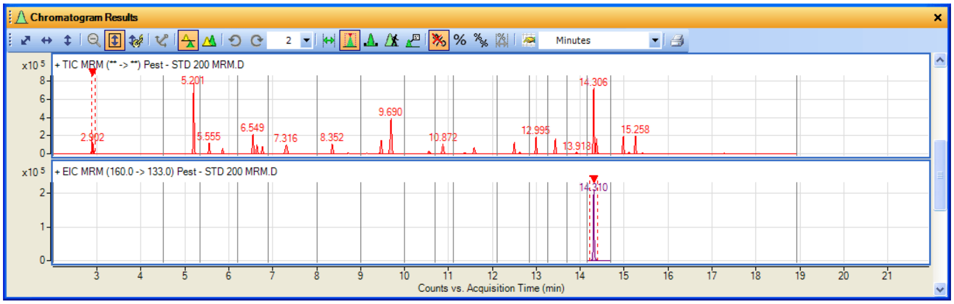



**図 53**　積分された MRM クロマトグラム

| | | |
|---|---|---|
| **6** ［**MS/MS (GC)**］インテグレータを選択します。絶対高さが 10,000 以上のピークのみを受け入れるようにフィルタを変更します。 | **a** ［メソッドエクスプローラ］ウィンドウで、［**クロマトグラム**］>［**積分 (MS/MS)**］ を選択します。<br>**b** インテグレータ選択で ［**MS/MS (GC)**］ を選択します。<br>**c** ［**ピークフィルタ**］ タブをクリックします。<br>**d** ［**フィルタをオン**］ で ［**ピーク高さ**］ をクリックします。<br>**e** ［高さフィルタ］ で、［**絶対高さ**］ チェックボックスをオンにします。<br>**f** ［**絶対高さ**］に `10000` を入力します。 | • 現在のメソッドに保存されている値から設定を変更すると、青色三角形が表示されます。メソッドを保存すると、三角形は消えます。 |

タスク 19. クロマトグラムの積分（GC/MS）（続き）

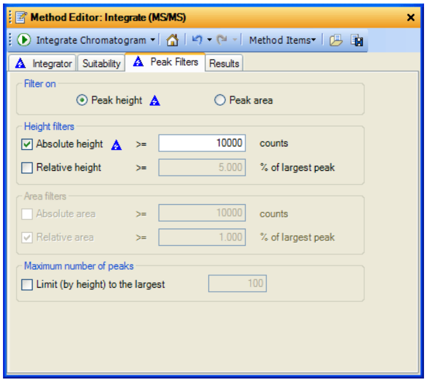



図 54　［絶対高さ］をオンにした［ピークフィルタ］タブ

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|
| 7 クロマトグラムを再積分します。 | g ［メソッドエディタ］ツールバーの ボタンをクリックします。 | • これで、指定した最大ピークのみが積分されます。 |

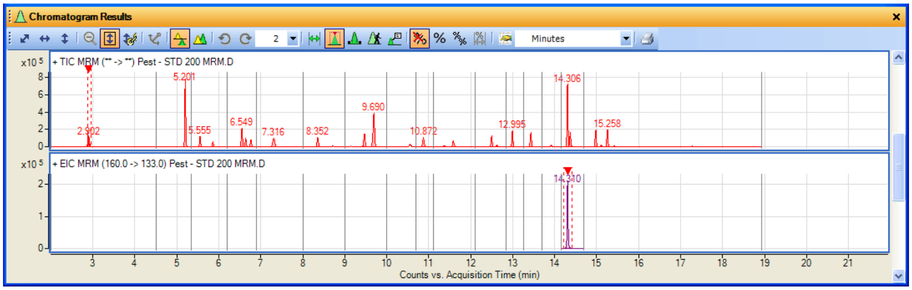



図 55　最大ピーク表示のスレッショルドを設定して積分された TIC と EIC の MS/MS クロマトグラム

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|
| 8 現在のメソッドに保存されている設定を復元し［メソッドエディタ］を閉じます。 | a ［メソッドエクスプローラ］の［クロマトグラム］>［積分 (MS/MS)］セクションを選択します。<br>b アイコン をクリックします。<br>c ［メソッドエクスプローラ］の［クロマトグラム］>［積分 (MS)］セクションを選択します。<br>d アイコン をクリックします。<br>e ［メソッドエディタ］ウィンドウを閉じます。 | • 変更をキャンセルし、読み込まれたメソッドから値を復元するには、［メソッドエディタ］ツールバーの［**最後に保存したファイルの値に復元**］アイコン をクリックします。 |

タスク 19. クロマトグラムの積分（GC/MS）（続き）

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
| --- | --- | --- |
| **9** オリジナルのクロマトグラムを除き、すべてのクロマトグラムを削除します。オリジナルのクロマトグラムの積分結果を削除します。 | **a** ［データナビゲータ］ウィンドウの［ユーザークロマトグラム］の下で、オリジナルのクロマトグラムを除きすべてのクロマトグラムをハイライトします。<br>**b** ハイライトしたクロマトグラムを右クリックし、**［削除］**をクリックします。<br>**c** すべての TIC クロマトグラムを選択します。<br>**d** **［クロマトグラム］ > ［結果の消去］**をクリックします。 | • ［結果の消去］コマンドを使用する場合、クロマトグラムは削除されません。クロマトグラムに関連する結果が削除されます。この場合は、積分値が消去されます。 |

# タスク 20. GC/MS データファイルの基本タスク

このタスクでは、クロマトグラムで指定したスペクトルを抽出します。定性分析プログラムでは、特定のデータポイントからスペクトルを抽出したり、複数のデータポイントまたは範囲の平均から平均スペクトルを抽出したりすることができます。

このタスクでは、クロマトグラムを進める方法、スペクトル表示オプションの変更方法、バックグラウンドスペクトルの減算方法、そしてピークスペクトルの積分と抽出を学習します。

タスク 20. GC/MS データファイルの基本タスク

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
| --- | --- | --- |
| **1** ［クロマトグラムを進める］を使用して **Pest - STD 200 MRM.d** の最後の 2、3 個のピークのプリカーサイオンとプロダクトイオンを表示します。<br>• 13～16分の範囲を拡大します。<br>• ［クロマトグラムを進める］アイコンを使用します。<br>• 約 13 分に始まるスペクトルをレビューし、矢印を右に移動させます。 | **a** ［データナビゲータ］ウィンドウで **Pest - 200 - Scan.D** をオンにします。<br>**b** ［データナビゲータ］ウィンドウで **TIC MRM** クロマトグラムをクリックします。<br>**c** ［メソッドエディタ］ウィンドウを閉じます。<br>**d** ［MS スペクトル結果］ウィンドウを閉じます。<br>**e** ［クロマトグラム結果］ツールバーの［**ズーム中に Y 軸をオートスケール**］アイコン をクリックします。<br>**f** 最後の数個のピークを拡大するには、135 分のピークの上で右クリックし、16 分にドラッグした後、離します。<br>**g** ［クロマトグラム結果］ツールバーの［**クロマトグラムを進める**］アイコン をクリックします。<br>**h** ［クロマトグラムを進める］カーソルを約 13 分の X 軸上に移動させ、クリックします。<br>**i** スペクトル間を移動するには、キーボードの左右の矢印キーを使用します。 | • ［クロマトグラムを進める］ツールは、プリカーサイオンとプロダクトイオンを同定するために、MS/MS データで特に便利です。<br>• ［クロマトグラム結果］ウィンドウでクリックする各ポイントのスペクトルは、自動的に開く［スペクトルプレビュー］ウィンドウに自動的に表示されます。<br>• 2 つのスペクトルが［スペクトルプレビュー］ウィンドウに表示されることもあります。たとえば、13.431 分のピーク近辺でクリックする各ポイントに対して［スペクトルプレビュー］ウィンドウには 2 つのスペクトルが表示されます。 |

タスク 20. GC/MS データファイルの基本タスク

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
| --- | --- | --- |

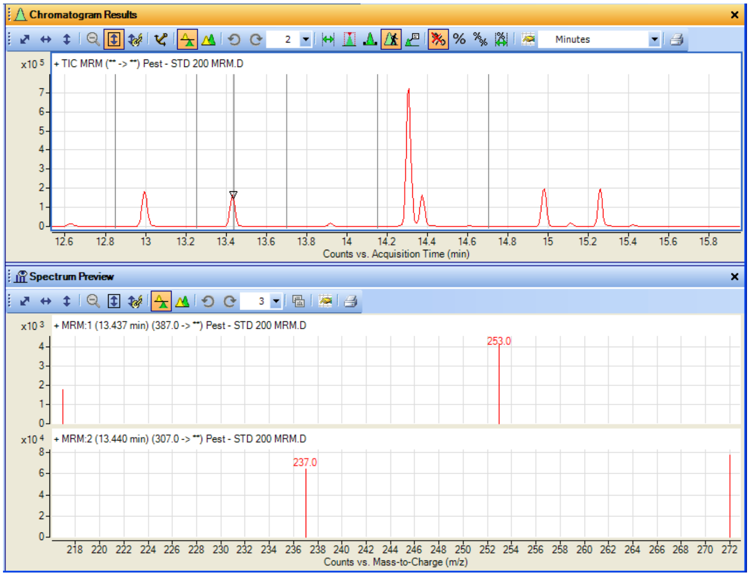



**図 56**　［クロマトグラムを進める］を使用して 13.437 分のピークの 2 つの MRM スペクトルを表示

タスク 20. GC/MS データファイルの基本タスク

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
| --- | --- | --- |
| 2 **Pest - STD 200 MRM.d** データファイルの 5.2 分のピークと 14.3 分のピークでの特定のデータポイントのスペクトルを抽出します。<br>• 「コメント」で説明しているオプションのいずれかを用いて、5.2 分または 5.2 分付近のピーク、および谷のいずれかからスペクトルを抽出します。<br>• 14.3分または14.3分付近のピークからスペクトルを抽出します（まだ谷からは抽出しません）。<br>• 表示を変更し、3 つ以上のスペクトルを表示します。 | **a** ［クロマトグラム結果］ツールバーの［**範囲選択**］アイコン をクリックします。<br>**b** ［スペクトルプレビュー］ウィンドウを閉じます。<br>**c** ［クロマトグラム結果］ツールバーの［**オートスケール（ズーム解除）**］アイコン をクリックします。<br>**d** 5.2 分のピークを拡大するには、4.0 分のピークの上で右クリックし、6.0 分にドラッグした後、離します。<br>**e** 5.2 分近辺のピークで、コメント列に記載したいずれかの方法でスペクトルを抽出します。<br>**f** 5.1 分近辺の谷で、スペクトルを抽出します。<br>**g** ［クロマトグラム結果］ツールバーの［**オートスケール（ズーム解除）**］アイコン をクリックします。<br>**h** 14 ～ 15 分の範囲を拡大します。<br>**i** 14.3 分近辺のピークで、コメント列に記載したいずれかの方法でスペクトルを抽出します（谷のスペクトルはまだ抽出しません）。<br>**j** 必要に応じて［MS スペクトル結果］ツールバーの［**リストペインの最大数**］アイコンで 4 を選択します。 | • ズームする場合［ズーム中に Y 軸をオートスケール］アイコン がオンになっていることを確認します。オンの場合、アイコンの背景色はオレンジ色です。<br>• 以下のいずれかの方法でスペクトルを抽出できます。<br>  • クロマトグラムのデータポイントをダブルクリックします。<br>  • クロマトグラムのデータポイントをクリックした後、クロマトグラム内を右クリックします。［**MS スペクトルの抽出**］をクリックします。［スペクトルの抽出］ダイアログボックスが表示されます。<br>  **sulfas_PosTargetedMSMS.d** ファイルが選択されていることを確認し［スペクトルの抽出］ダイアログボックスの［**抽出**］をクリックします。<br>• スペクトルを初めて抽出した時に、［MS スペクトル結果］ウィンドウが表示され、スペクトルが表示されます。［ユーザースペクトル］の下にそのスペクトルのタイプとリテンションタイムが表示されます。抽出したスペクトルすべては、両方の場所に表示されます。 |

## タスク 20. GC/MS データファイルの基本タスク

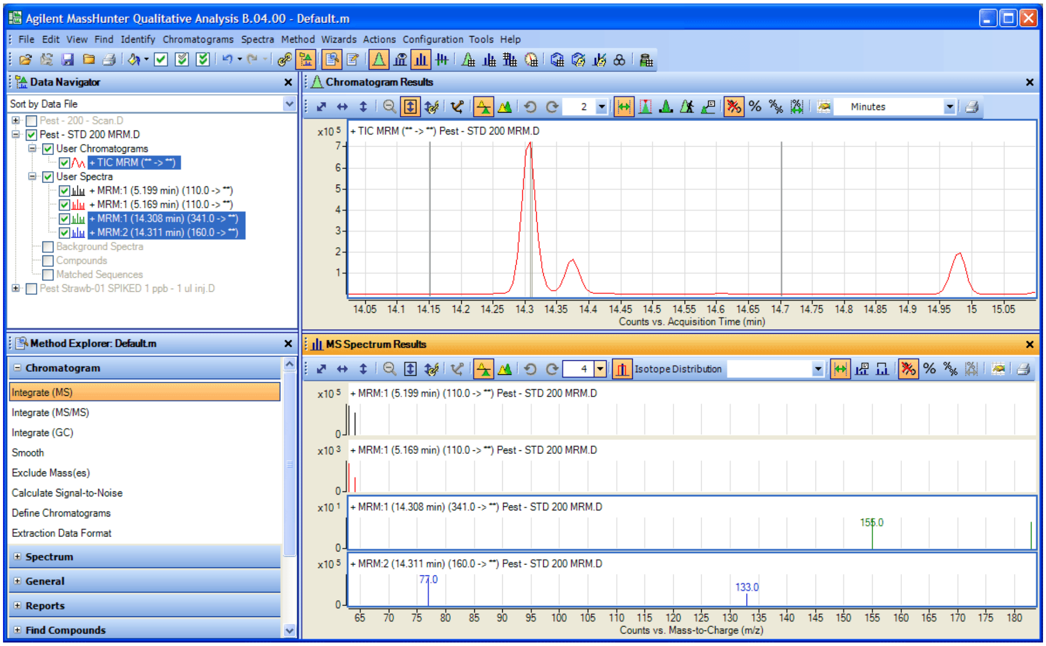



**図 57**　5.2 分のピークからの 2 つの MRM スペクトルと、14.3 分のピークからの 2 つの MRM スペクトルを表示するメインウィンドウ

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
| --- | --- | --- |
| **3　Pest - STD 200 MRM.d** データファイルの 14.35 分の谷の MS スペクトルを抽出します。<br>• ［スペクトルプレビュー］を表示します。<br>• リテンションタイム 14.3 分の谷からスペクトルを抽出します。<br>• このスペクトルを User Spectra フォルダにコピーします。<br>• 表示を変更し、6 つのスペクトルを表示します。<br>• ［スペクトルプレビュー］をオフにします。 | **a**　［スペクトルプレビュー］アイコン をクリックします。<br>**b**　14.3 分近辺の谷で、スペクトルを抽出します。<br>**c**　［スペクトルプレビュー］ウィンドウでスペクトルを右クリックし **［ユーザースペクトルにコピー］**をクリックします。 スペクトルは［データナビゲータ］の［ユーザースペクトル］セクションにコピーされ［MS スペクトル結果］ウィンドウに表示されます。<br>**d**　［スペクトルペイン］リスト隣の下矢印をクリックし、**6** を選択します。<br>**e**　［スペクトルプレビュー］ウィンドウを閉じます。 | • ［スペクトルプレビュー］が有効な場合、手動で選択したスペクトルは［データナビゲータ］の［ユーザースペクトル］セクションではなく、［スペクトルプレビュー］ウィンドウに表示されます。<br>• ［スペクトルプレビュー］がオンの場合、新しいスペクトルを抽出すると、前のスペクトルは上書きされます。<br>• クロマトグラムのスペクトルを素早くレビューしたり、保存するスペクトルが少ない場合は［スペクトルプレビュー］モードが便利です。 |

タスク 20. GC/MS データファイルの基本タスク

**図 58** ［クロマトグラム結果］ウィンドウと［MS スペクトル結果］ウィンドウ

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|
| **4** **Pest - STD 200 MRM.d** データファイルで、14.3 分のピークの指定範囲のすべてのポイントを平均したスペクトルを抽出します。<br>• ズームを解除します。<br>• ［クロマトグラム］ツールバーの［範囲選択］アイコンを使用します。<br>• 範囲をピーク全体に設定します。<br>• 記載されたオプションを用いてスペクトルを抽出します。 | **a** ［クロマトグラム］ツールバーの［**範囲選択**］アイコン をクリックします。<br>**b** 14.3 分のピークの底の左側をクリックし、同じピークの底の右側にドラッグします。<br>**c** 右記のオプションのいずれかを用いて、平均スペクトルを抽出します。<br>**d** ［MS スペクトル結果］ウィンドウの［リストペインの最大数］で **2** を選択します。 | • クロマトグラム内の選択範囲をダブルクリックすると、平均スペクトルを抽出できます。<br>• あるいは、クロマトグラム内を右クリックし、ショートカットメニューから［**MS スペクトルの抽出**］をクリックします。<br>• 2 つの平均 MRM スペクトルが表示されます。 |

タスク 20. GC/MS データファイルの基本タスク

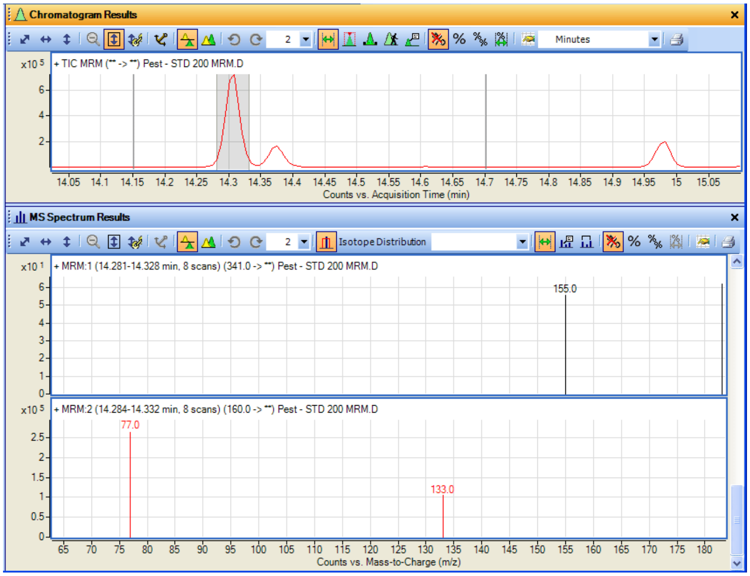



**図 59** ［クロマトグラム結果］と 2 つの平均スペクトルを表示した［MS スペクトル結果］

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
| --- | --- | --- |
| **5 Pest - STD 200 MRM.d** データファイルの 5.2 分と 14.3 分のピーク範囲を一緒に平均したスペクトルを抽出します。<br>• ヒント：［範囲選択］アイコンと〈Ctrl〉キーを用いて、まずひとつめのピークの範囲を選択します。<br>• 右記のいずれかのオプションを用いて、スペクトルを抽出します。 | **a**［クロマトグラム結果］ツールバーの［**オートスケール（ズーム解除）**］アイコン をクリックします。<br>**b**〈**Ctrl**〉キーを押します。<br>**c** 最初のピーク左側の約　5.0　分をクリックし、右側の約 5.3 分の上にドラッグし、マウスを離します。<br>**d**〈**Ctrl**〉キーを離します。<br>**e** 以下オプションまたは右記のオプションのいずれかを用いて、平均スペクトルを抽出します。<br>• いずれかのピークの選択範囲内をダブルクリックします。 | • 2 番目のピークはステップ 4 で既に範囲が選択されています。<br>• スペクトルを抽出するために、クロマトグラム内を右クリックし［**MS スペクトルの抽出**］をクリックすることもできます。［スペクトルの抽出］ダイアログボックスが表示されます。［**抽出**］をクリックします。 |

## タスク 20. GC/MS データファイルの基本タスク

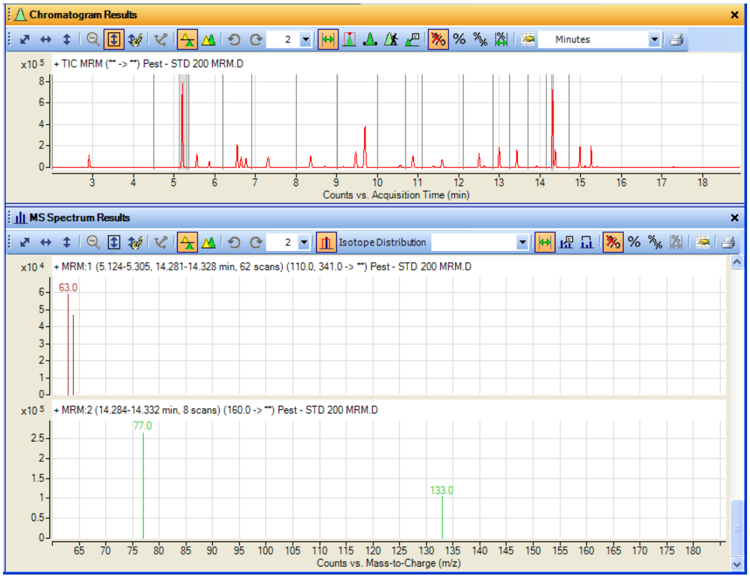



**図 60** クロマトグラムの 2 つの異なる範囲からの 2 つの平均スペクトル

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|
| **6** **Pest - STD 200 MRM.d** からピークスペクトルを抽出する際、バックグラウンドスペクトルを減算します。<br>• ［データナビゲータ］の［ユーザースペクトル］にあるスキャンをすべて削除します。<br>• ピークの開始とピークの終了のスペクトルの平均であるバックグラウンドスペクトルを抽出します。<br>• 積分したピークのピークスペクトルを抽出します。 | **a** ［データナビゲータ］の［ユーザースペクトル］行をクリックします。［ユーザースペクトル］行を右クリックし［**削除**］をクリックします。<br>**b** ［**はい**］をクリックします。<br>**c** ［メソッドエクスプローラ］で［**スペクトル**］>［**抽出 (MS/MS)**］を選択します。<br>**d** ［**ピークスペクトル抽出　(MS/MS)**］タブをクリックします。<br>**e** ［**ピークスペクトルバックグラウンド**］リストから［**ピーク開始点と終了点のスペクトルの平均**］を選択します。<br>**f** ［クロマトグラム結果］ツールバーの［**ピーク選択**］アイコン、 をクリックします。<br>**g** ［**クロマトグラム**］>［**積分**］コマンドをクリックします。<br>**h** 5.201 分のピークを選択します。<br>**i** 右クリックし、ショートカットメニューから［**ピークスペクトルの抽出**］をクリックします。 | • この処理の最後に、抽出したピークスペクトルすべてに対して、指定したバックグラウンドスペクトルが自動的に減算されることを確認してください。 |

タスク 20. GC/MS データファイルの基本タスク

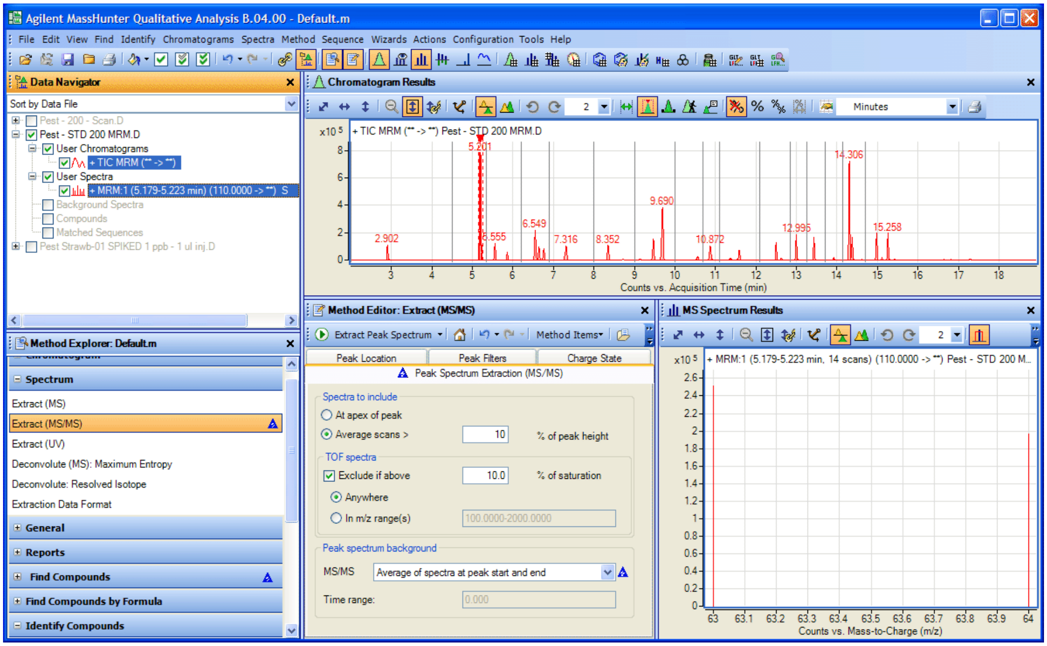



図 61　バックグラウンドピークスペクトルを減算したピークスペクトル

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|
| **7** Pest - STD 200 MRM.d データファイルからのピークスペクトルの積分と抽出を行います。 | **a** ［データナビゲータ］ウィンドウで TIC MRM クロマトグラムをクリックします。<br>**b** ［クロマトグラム］>［ピークスペクトルの積分と抽出］をクリックします。 | |

## タスク 20. GC/MS データファイルの基本タスク

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|

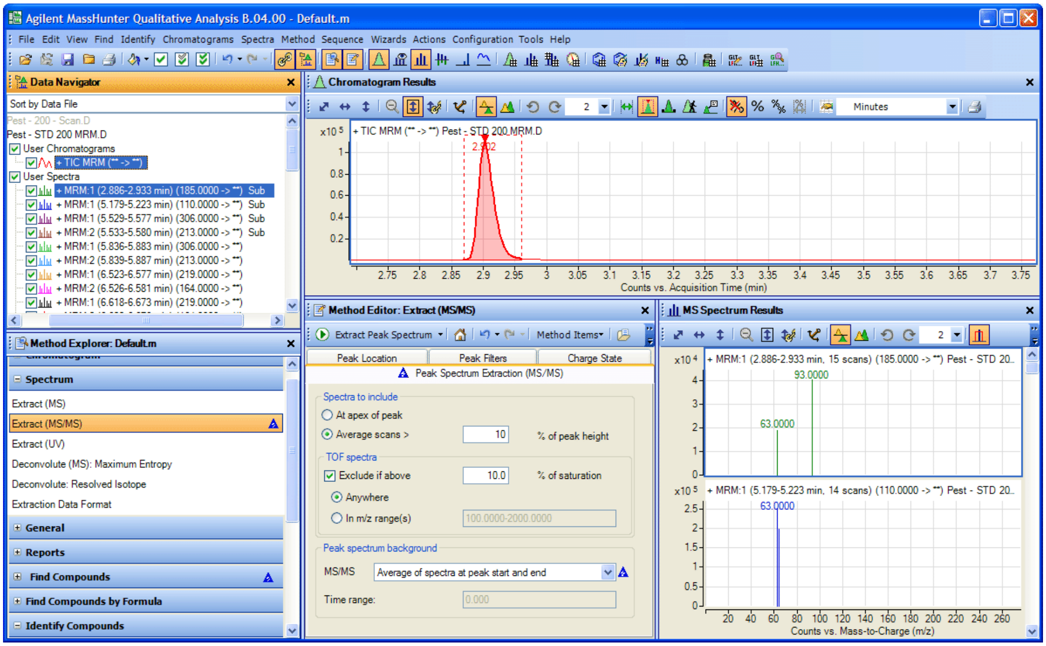



図 62　ピークスペクトルの積分と抽出

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|
| **8** データファイルを閉じ、LC/MS/MS のユーザーインターフェイス コンフィグレーションに戻ります。 | **a** ［ファイル］>［データファイルを閉じる］をクリックします。<br>**b** すべてのファイルを選択します。<br>**c** ［閉じる］をクリックします。<br>**d** ［コンフィグレーション］>［ユーザーインターフェイス コンフィグレーション］をクリックします。<br>**e** すべてのチェックボックスをオンにします。<br>**f** ［OK］をクリックします。<br>**g** メソッドの変更を保存するかどうかの問いでは［いいえ］をクリックします。 | • これらのチェックボックスをオンにしないと、アルゴリズムの一部が使用できなくなります。 |

# 実習 2
# 化合物の検出と同定

MS データのタスク（LC/MS - TOF、Q-TOF、トリプル四重極） 91
タスク 1. Molecular Feature による化合物の検出（LC/MS - MS のみ） 91
タスク 2. 化学式の作成と化合物の同定（LC/MS - MS のみ） 96
タスク 3. 化合物レポートの印刷（LC/MS - MS のみ） 99
タスク 4. 化学式による化合物の検出とサンプル純度の計算（LC/MS - MS のみ） 101
タスク 5. タンパク質消化物の Molecular Feature Extraction の実行（LC/MS - MS のみ） 105
MS/MS データのタスク（LC/MS - Q-TOF、トリプル四重極） 108
タスク 1. 化合物の検出（LC/MS - MS と MS/MS） 108
タスク 2. 化合物の同定と化学式の推定（LC/MS - MS と MS/MS） 111
タスク 3. 化合物レポートの印刷（LC/MS - MS/MS） 114
タスク 4. 化合物の検出と精密質量ライブラリの検索（LC/MS - MS/MS） 116
タスク 5. タンパク質消化物の Molecular Feature Extraction の実行（LC/MS - MS と MS/MS） 119
GC-MS データのタスク（トリプル四重極） 121
タスク 1. クロマトグラムデコンボリューションによる化合物の検出（GC/MS） 121
タスク 2. ライブラリ検索アルゴリズムによる化合物の同定（GC/MS） 124
タスク 3. MRM による化合物の検出（GC/MS - MRM のみ） 126

最初の 2 つのタスクでは、複雑なマトリックス中の低濃度サルファ剤を検出および同定し、TOF と Q-TOF の両データに対して化学式を作成します。TOF と Q-TOF の両データを用いた、タンパク質消化物の Molecular Feature Extraction も行います。トリプル四重極データでも、これらのタスクを実行できます。

3 つめのタスクでは、GC/MS の農薬データファイルの化合物を検出および同定します。[クロマトグラム デコンボリューションによる化合物の検出] アルゴリズムを使用して化合物を検出します。化合物の同定には [ユニットマスライブラリの検索] アルゴリズムを使用します。

実習方法を示す表は、以下の 3 列に分けて表示されています。

- ステップ - 操作概要です。各自でプログラムを実行します。
- 詳細説明 - ステップの実行に必要な手順を示しています。
- コメント - 実習の各ステップに関するヒントや追加情報を記しています。

# MS データのタスク（LC/MS - TOF、Q-TOF、トリプル四重極）

## タスク 1. Molecular Feature による化合物の検出（LC/MS - MS のみ）

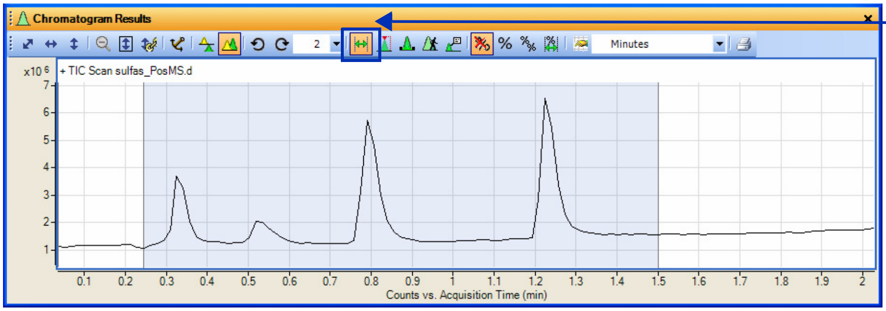
［化合物の検出］アルゴリズムにより、データ中の化合物を検出し、各化合物の平均 MS スペクトルを作成します。この機能は、複雑なデータから情報を「採掘」するための簡単な方法です。このアルゴリズムは、MS スキャンデータを含むデータのみに使用できます。ユニットマス分解能を含むデータ（トリプル四重極データなど）では動作しません。

タスク 1. 化合物の検出（LC/MS - MS のみ）

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|
| 1 **sulfas_PosMS.d** クロマトグラムを開きます。<br>• 一般ワークフローを使用します。<br>• 0.24 ～ 1.5 分の範囲を選択します。 | a ［**MassHunter 定性分析**］アイコンをダブルクリックします。<br>b デモデータファイルのディレクトリの **sulfa_PosMS.d** データファイルをクリックします。［**結果データの読み込み**］チェックボックスをオフにして［**開く**］をクリックします。<br>c ［**コンフィグレーション**］>［**ワークフローのコンフィグレーション**］>［**一般**］をクリックします。［ワークフロー コンフィグレーション］ダイアログボックスが開きます。<br>d メソッドの変更を保存しない場合は、［**現在のメソッドを保存する**］チェックボックスをオフにします。<br>e ［**ワークフローのデフォルトメソッドを読み込む**］ボタンをクリックします。<br>f ［**ワークフローのデフォルトレイアウトを読み込む**］ボタンをクリックします。<br>g ［**OK**］をクリックします。<br>h ［**範囲選択**］ツールをクリックし、0.24 ～ 1.5 分の範囲を選択します。 | • Default.mメソッドが自動的に読み込まれます。このメソッドを対話的に読み込むには、［**メソッド**］>［**開く**］をクリックします。Default.m を選択し、［**開く**］をクリックします。<br>• ウィンドウがアクティブの時に `F1` キーを使用すると、ウィンドウ、ダイアログボックス、タブに関するヘルプが表示できます。<br>• ワークフローを切り替える際には［ワークフロー コンフィグレーション］ダイアログボックスが開きます。<br>• ［**現在のメソッドを保存する**］チェックボックスをオンにすると、メソッドは現在のメソッドに自動的に保存されます。メソッドが default.m の場合は、［メソッドの保存］ダイアログボックスが開きます（default.m メソッドは上書きできません）。 |

タスク 1. 化合物の検出（LC/MS - MS のみ）（続き）

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
| --- | --- | --- |



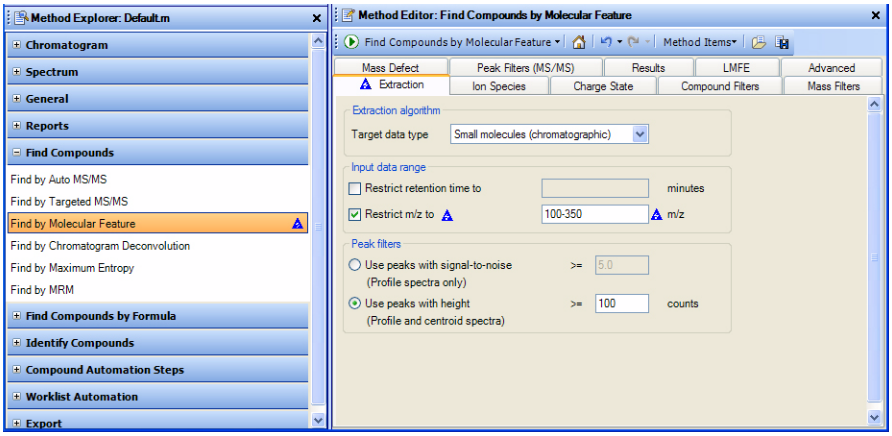

［範囲選択］ツール

**図 63** TIC クロマトグラムで時間範囲を選択

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
| --- | --- | --- |
| **2** クロマトグラムの化合物を検出します。<br>• m/z を 100 ～ 350 に制限します。<br>• すべての化合物のクロマトグラムとスペクトルが見えることを確認します。 | **a** ［メソッドエクスプローラ］ウィンドウで、**［化合物の検出］ > ［Molecular Feature による検出］**をクリックします。<br>**b** ［ターゲット］のデータタイプに**［低分子 ( クロマトグラフ )］**を選択します。<br>**c** **［m/z の制限］**チェックボックスをオンにします。<br>**d** `100-350` を入力します。 | • **［ターゲット］のデータタイプ**の詳細については、オンラインヘルプを参照してください。<br>• 化合物を検出するクロマトグラム範囲を選択します。図 63 を参照してください。<br>• 現在のメソッドに保存されている値から設定を変更すると、青色三角形が表示されます。メソッドを保存すると、三角形は消えます。 |

タスク 1. 化合物の検出（LC/MS - MS のみ）（続き）

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
| --- | --- | --- |




［LMFE］および［詳細］タブは、[ユーザーインターフェイス コンフィグレーション］ダイアログボックスで［詳細］チェックボックスがオンの場合にのみ使用できます。

**図 64**　Molecular Feature による化合物の検出 - 質量範囲の制限

**e**　［結果］タブをクリックします。

**f**　［**MFE スペクトルの抽出**］および［**ECC の抽出**］チェックボックスをオンにします。

**g**　［**最大のものから指定数のみ表示**］チェックボックスをオンにして、化合物の数に 4 を入力します。

• 1 つまたは複数の化合物がハイライトされている場合、［**検出**］> ［**完全な結果セットを抽出**］コマンドを用いて検出した後、化合物の結果一式を抽出できます。［データナビゲータ］ウィンドウで 1 つまたは複数の化合物を選択し、ショートカットメニューで［**完全な結果セットを抽出**］コマンドをクリックすることもできます。

タスク 1. 化合物の検出（LC/MS - MS のみ）（続き）

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|

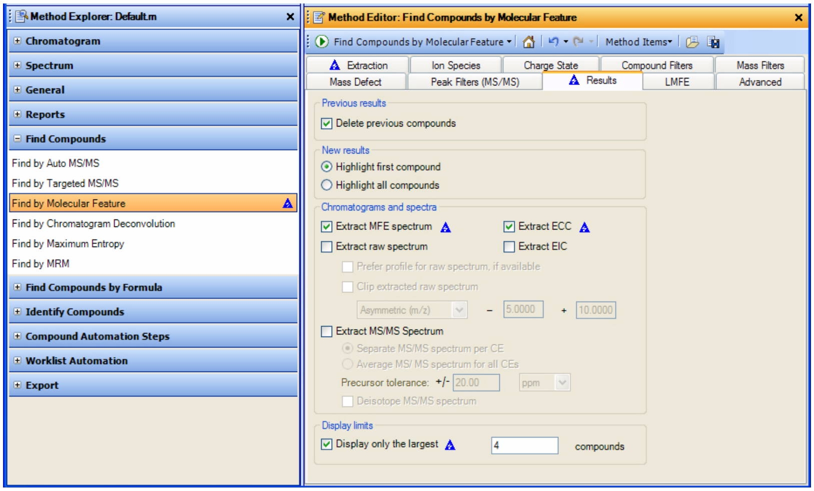



**図 65** ［Molecular Feature による化合物の検出］＞［結果］タブの値を変更

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|
| | **h** をクリックして、データファイルに対して［**Molecular Feature による化合物の検出**］アルゴリズムを実行します。<br>**i** ［MS スペクトル結果］ウィンドウの［**リストペインの最大数**］を **4** に変更します。<br>**j** ［MS スペクトル結果］ツールバーの［**ズーム中に Y 軸をオートスケール**］アイコン をクリックします。<br>**k** 270 ～ 350 の m/z 範囲を拡大します。 | • 定性分析プログラムにより、選択した範囲から 4 つの主要化合物が検出されます。<br>• ［メソッドエディタ］ツールバーで をクリックすると、選択した範囲が自動的に使用されます。［**検出**］＞［**Molecular Feature による化合物の検出**］メニューコマンドでは、［**クロマトグラム全体**］または［**選択範囲**］のいずれかをクリックします。<br>• クロマトグラムは、重ね描きモードで表示することもできます。重ね描きモードでは、一番上（トップ）のクロマトグラムのラベルのみが表示されるように選択できます。［**コンフィグレーション**］＞［**クロマトグラムの表示オプション**］コマンドをクリックして、［**トッププロットのみラベル付け**］のチェックを変更します。 |

タスク 1. 化合物の検出（LC/MS - MS のみ）（続き）

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|

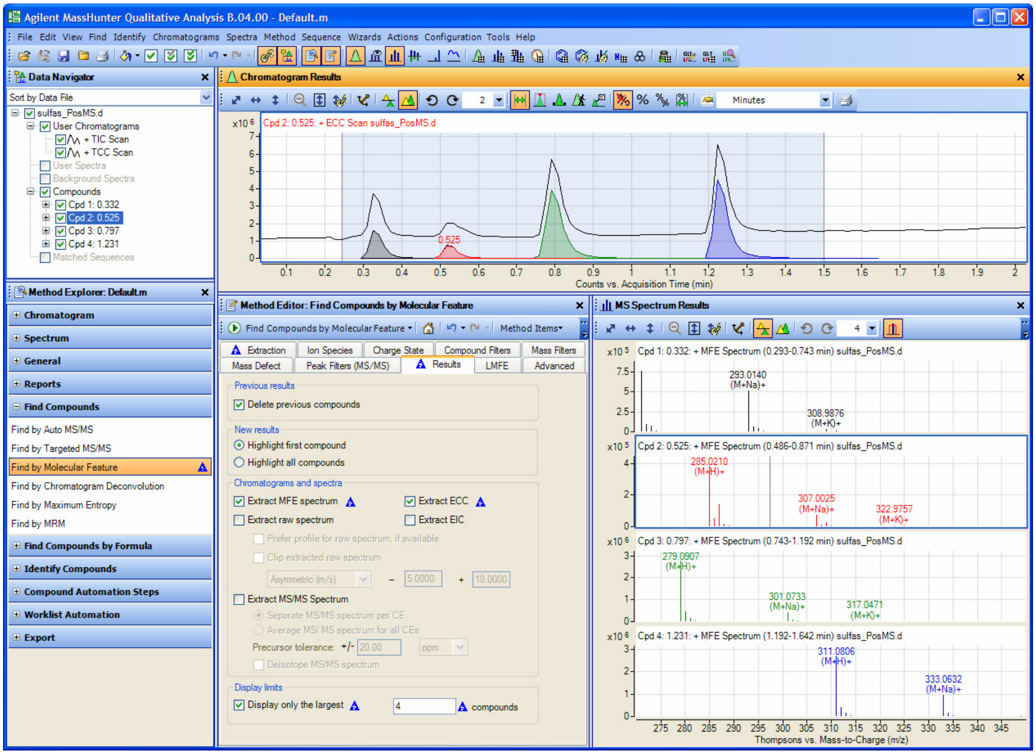



**図 66**　サルファ剤混合物中の 4 つの化合物すべてを検出

# タスク 2. 化学式の作成と化合物の同定（LC/MS - MS のみ）

このタスクでは、使用できる可能性のある化学式を作成し、タスク 1 で検出された各化合物を検索します。

タスク 2. 化学式の作成と化合物の同定（LC/MS - MS のみ）

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
| --- | --- | --- |
| **1** 化合物 1 ～ 4 の化学式を作成します。<br>• 各化合物の［MS 化学式結果］を表示します。<br>• ［化合物リスト］を表示します。<br>• ［MS スペクトル結果］ウィンドウを閉じます。<br><br>ヒント：図 68 と同じ結果を得るためには、同位体モデルに［**一般的な有機分子**］を選択してください。 | **a** ［メソッドエクスプローラ］ウィンドウで、［**化合物の同定**］>［**化学式の作成**］をクリックします。<br>**b** ［メソッドエディタ］ウィンドウで、［**電荷の状態**］タブをクリックし、同位体モデルに［**一般的な有機分子**］を選択します。<br>**c** ［データナビゲータ］ウィンドウで［**化合物**］をクリックしてすべての化合物をハイライトします。<br>**d** ［**同定**］>［**化合物から化学式を作成**］コマンドまたは［**化合物から化学式を作成**］アイコン をクリックして、アルゴリズムを実行します。<br>**e** 必要に応じて、［化合物同定結果］アイコン をクリックするか、または［**表示**］>［**化合物同定結果**］コマンドをクリックします。<br>**f** 必要に応じて［**表示**］>［**化合物リスト**］をクリックします。<br>**g** ［化合物リスト］ウィンドウで、ツールバーの［**列の自動表示**］**ボタン**をクリックします。<br>**h** ［化合物同定結果］ウィンドウで、ツールバーの［**列の自動表示**］ボタンをクリックします。<br>**i** ［化合物リスト］および［化合物同定結果］ウィンドウで、［データを含まない列を隠す］アイコン を クリックします。<br>**j** ［メソッドエディタ］ウィンドウと［MS スペクトル結果］ウィンドウを閉じます。 | • デフォルトでは［MS/MS 化学式の詳細］ウィンドウは［クロマトグラム結果］と同じウィンドウにタブ表示されます。ウィンドウの下にあるタブをクリックし、ウィンドウを切り替えます。<br>• 該当する m/z で拡大すると、スペクトルプロットの予測同位体存在比が見えます。詳細は、オンラインヘルプを参照してください。<br>• ［メソッドエディタ］ツールバーの［実行］アイコン では、複数の処理から実行する処理を選択できる場合もあります。たとえば、このセクションの［実行］アイコンをクリックすると、2 つの異なる処理が行えます。矢印をクリックすると、可能な処理のリストが示され、どの処理を実行するかを選択できます。リストから違う処理を選択すると、デフォルトの処理が変更されます。実行ボタンをクリックすると、デフォルトの処理が実行されます。<br>• 列と列の境界線をドラッグして、列の幅を変更することができます。<br>• 列のヘッダーをドラッグして、列を移動することができます。<br>• ショートカットメニューから［**列の削除**］を選択して、列を非表示にできます。 |

## タスク 2. 化学式の作成と化合物の同定（LC/MS - MS のみ）

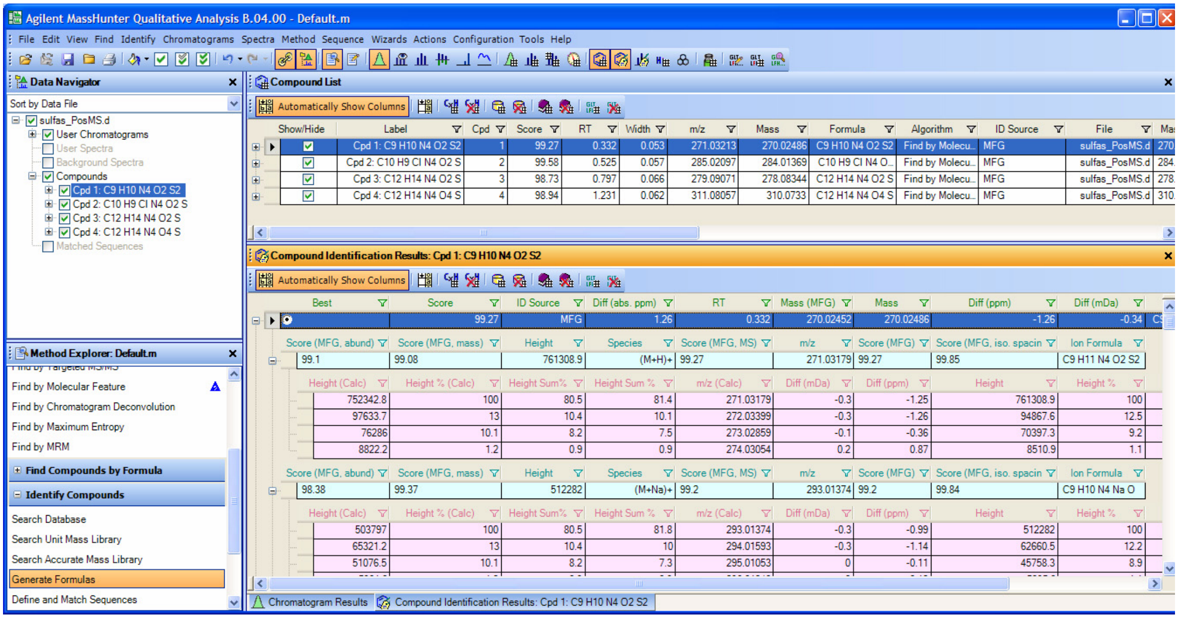



図 67 sulfas_PosMS.d における化合物 1 ～ 4 の化学式の作成結果

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|
| **2** 化合物 1 ～ 4 の化学式に基づき、データベース検索を実行します。<br>• 化学式のデータベース検索を行います。 | **a** ［データナビゲータ］ウィンドウで［**化合物**］をクリックします。<br>**b** ［メソッドエクスプローラ］ウィンドウで、［**化合物の同定**］>［**データベース検索**］をクリックします。<br>**c** ［検索基準］の［**分子式**］をクリックします。<br>**d** メインメニューで［**同定**］>［**データベースで化合物を検索**］をクリックします。<br>**e** ［メソッドエディタ］ウィンドウと［MS スペクトル結果］ウィンドウを閉じます。 | • ［メソッドエクスプローラ］のセクションをクリックすると、［メソッドエディタ］が自動的に開きます。<br>• ［化合物リスト］の 4 つのサルファ剤がすべて同定されたことを確認してください（図 68 を参照）。<br>• 化合物のすべての同定結果が［化合物同定結果］ウィンドウに表示されます。<br>• 一部の同定結果は［化合物リスト］ウィンドウにも表示されます。 |

タスク 2. 化学式の作成と化合物の同定（LC/MS - MS のみ）

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|
| **3** 表示されている列を変更します。 | **a** ［化合物リスト］ウィンドウを右クリックし、**［列の追加 / 削除］**をクリックします。<br>**b** 列名 CAS の横のチェックボックスをオンにし、**［OK］**をクリックします。CAS 列が空の場合は、情報を含む列が自動的に表示されます。<br>**c** 化合物リストの［データを含まない列を隠す］アイコン をクリックします。 | • ［列の削除］コマンドを使用してデータを含む列を削除した場合でも［列の自動表示］機能をオンにするとこの列は自動的に再表示されます。 |

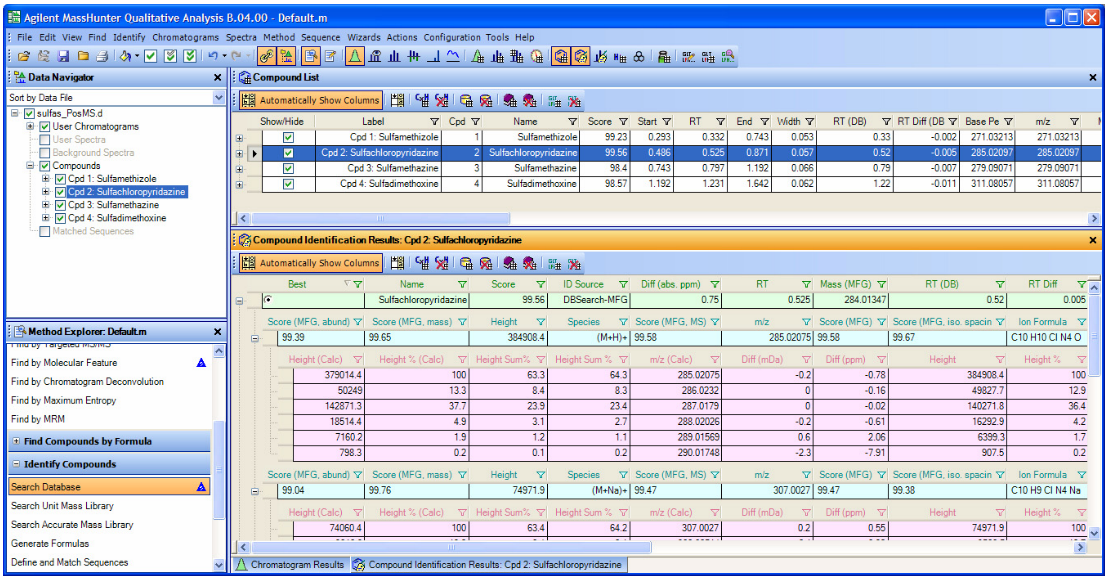



**図 68**　sulfas_PosMS.d における化合物 1 ～ 4 のデータベース検索と化学式作成の結果

# タスク 3. 化合物レポートの印刷（LC/MS - MS のみ）

タスク 1. Molecular Feature による化合物の検出（LC/MS - MS のみ）91 ページで検出し、タスク 2. 化学式の作成と化合物の同定（LC/MS - MS のみ）96 ページで同定した各化合物のレポートを作成します。

タスク 3. 化合物レポートの印刷（LC/MS - MS のみ）

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
| --- | --- | --- |
| **1** 化合物レポートに対するメソッドの選択の一部を変更します。<br>• 拡大された指定ピークの MS スペクトルの表示をオフにします。<br>• レポートの MS/MS オプションをオフにします。 | **a** ［メソッドエクスプローラ］で、**［レポート］**>**［化合物レポート］**をクリックします。<br>**b** **［MS　スペクトルの表示］**チェックボックスの選択を解除します。<br>**c** **［MS/MS スペクトルの表示］**チェックボックスの選択を解除します。<br>**d** **［MS/MS　ピークテーブルの表示］**チェックボックスの選択を解除します。 | • これらのチェックボックスから、レポートに含める情報を指定します（情報が使用できる場合）。情報が使用できない場合、該当セクションは自動的に省略されます。たとえば、データファイルに MS データしかない場合、MS/MS 結果がレポートに含まれることはありません。 |

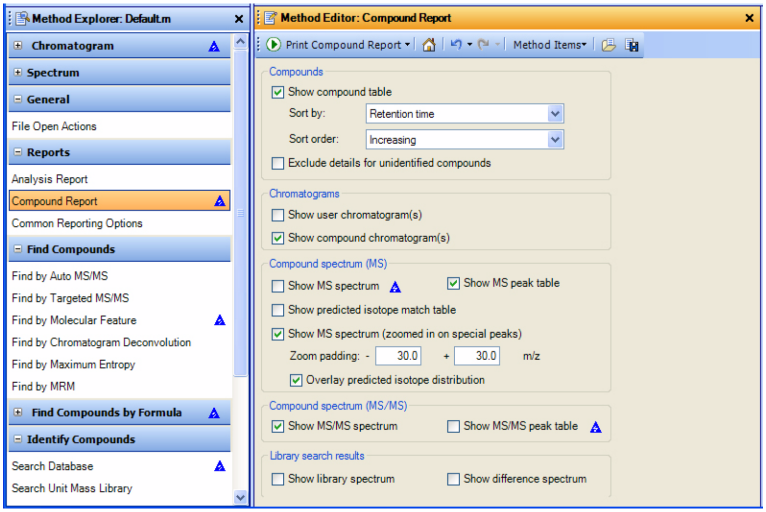
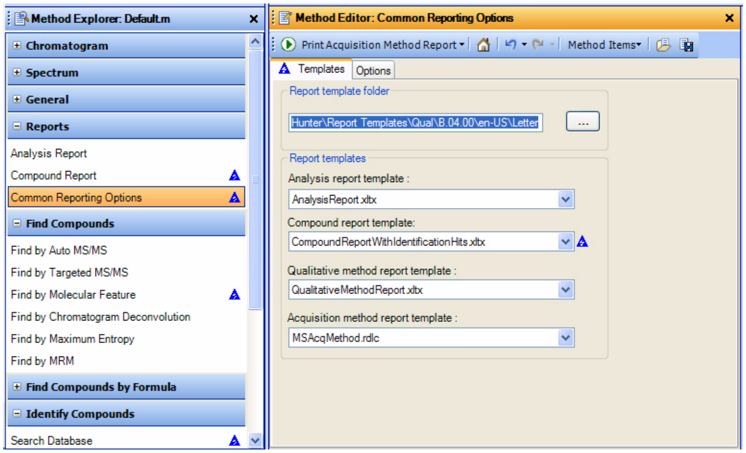



**図 69**　［メソッドエディタ］の［化合物レポート］セクション

タスク 3. 化合物レポートの印刷（LC/MS - MS のみ）

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|
| 2 （オプション）別の化合物レポートテンプレートを選択します。 | a ［メソッドエクスプローラ］ウィンドウで、**［レポート］>［共通レポートオプション］**をクリックします。<br>b 化合物レポートのテンプレートに、**CompoundReport WithIdentificationHits.xlsx** を選択します。 | • ソフトウェアには、複数のレポートテンプレートが含まれています。<br>• Excel および Report Designer アドインを使用して、レポートテンプレートをカスタマイズすることができます。 |




**Excel および Report Designer アドインを使用して、拡張子 XLTX を持つテンプレートをカスタマイズすることができます。測定メソッドレポートのカスタマイズはできません。**

**図 70** ［メソッドエディタ］の［共通レポートオプション］セクション

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|
| 3 レポートを印刷します。 | a **［ファイル］>［印刷］>［化合物レポート］**をクリックするか、**［解析レポートの印刷］**アイコン の矢印をクリックして**［化合物レポートの印刷］**をクリックし、化合物レポートを印刷します。<br>b **［印刷プレビュー］**チェックボックスをオンにします。<br>c **［OK］**をクリックします。レポートを確認します。<br>d **［印刷プレビューを閉じる］**アイコンをクリックします。 | • ［化合物レポートの印刷］ダイアログボックスでは、プリンタの選択、PDF または Excel ファイルへのレポートの保存の選択、すべての結果またはハイライトした結果のみの内容の選択、およびさまざまなデータファイルを 1 つのレポートにまとめるかどうかの選択ができます。<br>• 詳しい情報については、オンラインヘルプまたは「Report Designer Training DVD」を参照してください。 |
| 4 結果を保存せずに、データファイルを閉じます。 | a **［ファイル］>［データファイルを閉じる］**をクリックします。<br>b 結果の保存を求められたら**［いいえ］**をクリックします。 | |

# タスク 4. 化学式による化合物の検出とサンプル純度の計算（LC/MS - MS のみ）

［化合物の検出］アルゴリズムにより、データ中の化合物を検出し、各化合物の平均 MS スペクトルを作成します。この機能は、複雑なデータから情報を「採掘」するための簡単な方法です。また、サンプルの純度も計算できます。

タスク 4. 化学式による化合物の検出（LC/MS - MS のみ）

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|
| **1** **sulfas_PosMS.d** クロマトグラムを開きます。<br>• 一般ワークフローを使用します。<br>• 0.2 ～ 1.5 分の範囲を選択します。 | **a** **［ファイル］>［データファイルを開く］**をクリックします。<br>**b** **sulfas_PosMS.d** を選択して［**OK**］をクリックします。<br>**c** **［表示］>［ワークフロー用にコンフィグレーション］>［一般］**をクリックします。詳細は、91 ページの「sulfas_PosMS.d クロマトグラムを開きます。」を参照してください。<br>**d** ［クロマトグラム結果］ツールバーの**［ズーム中に Y 軸をオートスケール］**アイコン をクリックします。<br>**e** **［範囲選択］**ツールをクリックし、0.2 ～ 1.5 分の範囲を選択します。 | • 化学式の確認とサンプル純度のワークフローに切り替える場合、［化合物リスト］テーブルは自動的にサンプル純度の列を表示します。<br>• **［式の確認とサンプル純度ワークフロー］**セクションには［化学式による検出］セクションがあります。 |
| **2** クロマトグラムの指定範囲内の化合物を検出します。<br>• サンプル純度の計算を有効にします。<br>• TIC %、ADC %、UV A%、UV B% の純度値を計算します。<br>• 純度値には最大値を使用します。<br>• ［化合物リスト］ウィンドウに列を追加します。<br>• 結果をレビューします。 | **a** ［メソッドエクスプローラ］ウィンドウで、**［化学式による 化合物の検出］>［化学式による検出 - オプション］**セクションをクリックします。<br>**b** **［確認する式のソース］**として**［データベース］**をクリックし、default.csv を選択します。<br>**c** ［メソッドエクスプローラ］ウィンドウで、**［化学式による 化合物の検出］>［化学式による検出 - サンプル純度］**タブをクリックします。<br>**d** **［サンプル純度の計算］**チェックボックスをオンにします。<br>**e** **［TIC %］**、**［ADC %］**、**［UV A%］**、**［UV B%］**のチェックボックスをオンにします。<br>**f** **［選択したすべてのアルゴリズムの最大値］**をクリックします。<br>**g** **［最小許容純度］**ボックスに 20 を入力します。 | • タイトルバーをダブルクリックすると、フローティングウィンドウが固定されます。一般ワークフローのデフォルトでは、［メソッドエディタ］ウィンドウはフローティングです。ウィンドウのタイトルを右クリックして［**Floating**］をクリックすることもできます。<br>• 現在のメソッドに保存されている値から設定を変更すると、青色三角形が表示されます。メソッドを保存すると、三角形は消えます。<br>• このデータファイルには複数のサルファ剤が含まれるため、予想される純度は 20% 程度です。 |

タスク 4. 化学式による化合物の検出（LC/MS - MS のみ）（続き）

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|

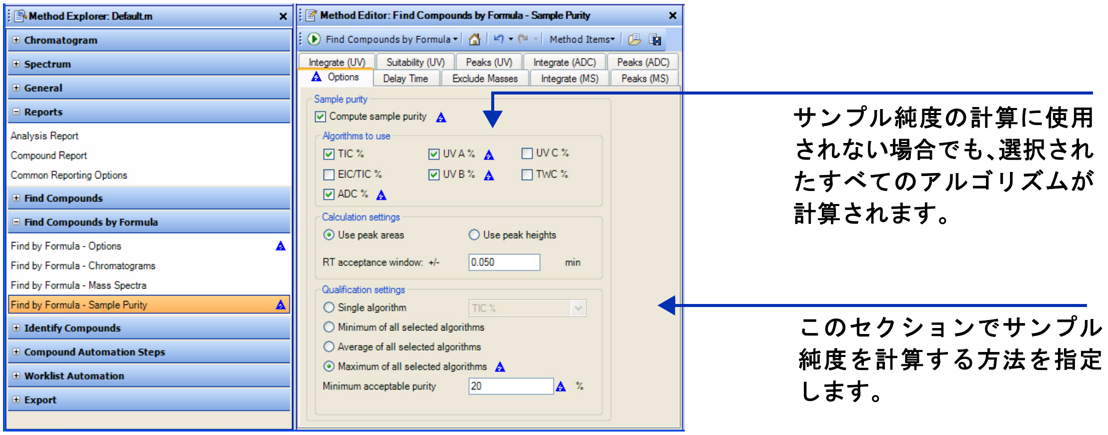



図 71 ［化学式による化合物の検出］アルゴリズム - サンプル純度オプションの設定

タスク 4. 化学式による化合物の検出（LC/MS - MS のみ）（続き）

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|
| | **h** をクリックして、データファイルに対して **[化学式による化合物の検出]** アルゴリズムを実行します。<br>**i** [MS スペクトル結果] ウィンドウの [リストペインの最大数] を 3 に変更します。<br>**j** **[表示]** > **[化合物リスト]** をクリックし、[化合物リスト] ウィンドウを開きます。<br>**k** [化合物リスト] ウィンドウで、ツールバーの **[列の自動表示]** アイコンがオフになっている場合は、アイコンをクリックします。<br>**l** [化合物リスト] ウィンドウの [データを含まない列を隠す] アイコン をクリックします。<br>**m** [化合物リスト] ウィンドウで、[列の自動表示] チェックボックスをオフにします。<br>**n** 含めない列をテーブルから削除します。 | • 定性分析プログラムにより、選択した範囲から 6 つの主要化合物が検出されます。<br>• [カテゴリ] 列をクリックすると、列は同じアルゴリズムごとに表示されます。列は、各セクションの中でアルファベット順に表示されます。<br>• [化合物リスト] は [定性分析] ウィンドウの上部にドッキングされ、さらに多くの列が表示できるようになります。ウィンドウの移動の詳細については、22 ページの「タスク 4. ウィンドウレイアウトの変更」を参照してください。<br>• [列の自動表示] アイコンがオフになっている場合は、以下の手順で [純度] 列を手動で表示します。<br>**a** 化合物リストの列を右クリックし、**[列の追加 / 削除]** をクリックして [列の追加 / 削除（拡張設定）] を開きます。<br>**b** **[カテゴリ]** 列ヘッダーをクリックして、列を並べ替えます。<br>**c** **[純度値]**、**[純度結果]**、**[ADC% 面積]**、**[TIC% 面積]**、**[UVA% 面積]**、**[UVB% 面積]** の各列をオンにします。<br>**d** **[OK]** ボタンをクリックします。 |

## タスク 4. 化学式による化合物の検出（LC/MS - MS のみ）（続き）

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|

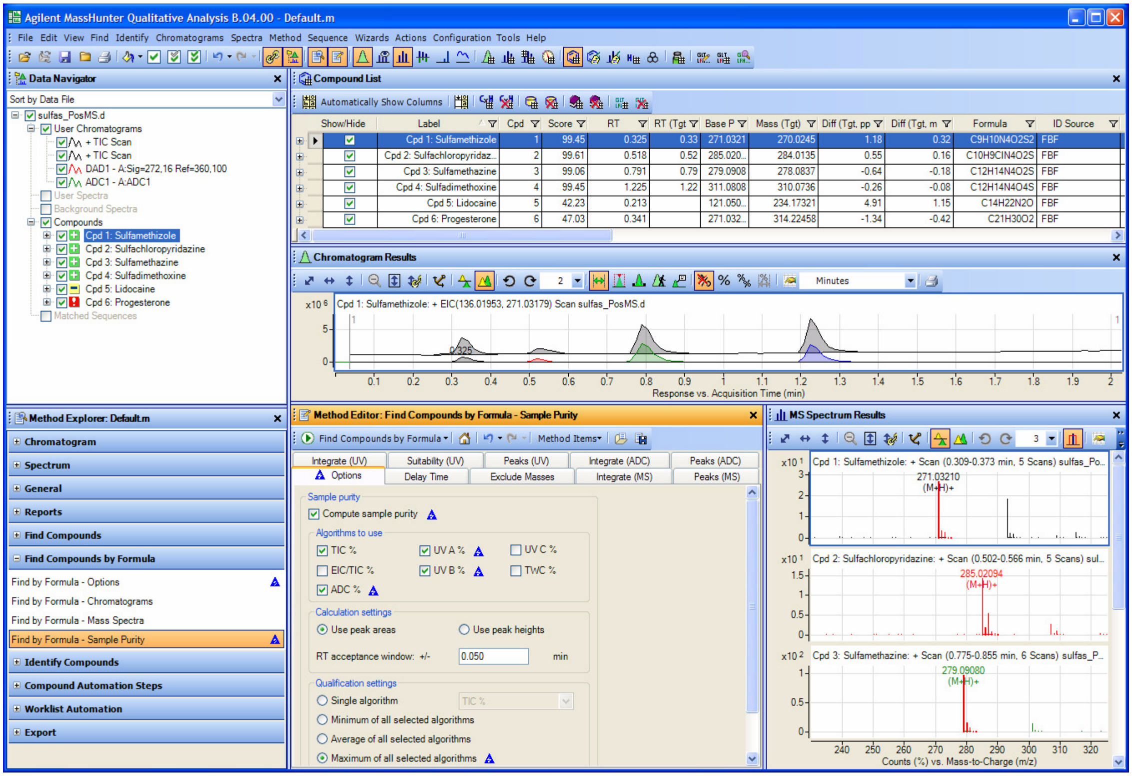



**図 72**　サルファ剤混合物中の 4 つの化合物すべての検出

- ［データナビゲータ］の［化合物］のアイコンは、化合物がサンプル純度テストに合格したかどうかを示します。

- ［純度値］列は次のように色分けされています。
  - 緑 - 合格
  - 黄色 - 不合格
  - 赤 - 測定不可

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|
| **3** 結果を保存せずに、データファイルを閉じます。 | **a** ［ファイル］>［データファイルを閉じる］をクリックします。<br>**b** 結果の保存を求められたら［いいえ］をクリックします。 | |

# タスク 5. タンパク質消化物の Molecular Feature Extraction の実行（LC/MS - MS のみ）

このタスクでは、MS データのみを用いてタンパク質消化物の Molecular Feature Extraction を行います。

タスク 5. タンパク質消化物の Molecular Feature Extraction の実行（LC/MS - MS のみ）

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|
| **1** Peptide Sequence Editor 機能を有効にします。 | **a** **［コンフィグレーション］>［ワークフローのコンフィグレーション］>［一般］**をクリックします。<br>**b** **［ワークフローのデフォルトメソッドを読み込む］**ボタンと**［ワークフローのデフォルトレイアウトを読み込む］**ボタンをクリックします。<br>**c** **［OK］**ボタンをクリックします。<br>**d** **［コンフィグレーション］>［ユーザーインターフェイス コンフィグレーション］**をクリックします。<br>**e** **［Peptide Sequence Editor］**チェックボックスをオンにします。<br>**f** **［OK］**ボタンをクリックします。 | • ［電荷の状態］タブの［ペプチド］オプションは、**［Peptide Sequence Editor］**または**［BioConfirm］**チェックボックスがオンになっている場合以外は使用できません。<br>• 一般ワークフローに切り替えて、レイアウトおよび表示されている［化合物］列をデフォルトに変更します。 |
| **2** 以下のパラメータを用いて、データファイル **peptide-ms-only.d** の Molecular Feature Extraction を行います。<br>• 時間範囲は 2.5 ～ 4 分です。<br>• 同位体モデルをペプチドに指定します。<br>• アバンダンスの最大 20 化合物のみを表示するようにフィルタをかけます。<br>• ウィンドウレイアウトを変更し、図 73（次ページ）に合わせます。 | **a** **peptide-ms-only.d** データファイルを開きます。<br>**b** ［メソッドエクスプローラ］ウィンドウで、**［化合物の 検出］>［Molecular Feature による検出］**をクリックし、［メソッドエディタ］ウィンドウにパラメータを表示します。<br>**c** **［抽出］**タブで、**［リテンションタイムの制限］**チェックボックスをオンにします。<br>**d** `2.5 - 4` を入力します。<br>**e** 必要に応じて**［m/z の制限］**チェックボックスをオフにします。<br>**f** **［電荷の状態］**タブの［同位体モデル］リストで**［ペプチド］**を選択します。<br>**g** **［化合物フィルタ］**タブで、**［最大化合物の数を制限する］**チェックボックスをオンにし、化合物数に `20` を入力します。<br>**h** **［結果］**タブで、**［MFE スペクトルの抽出］**と**［ECC の抽出］**チェックボックスをオンにします。<br>**i** をクリックして、データファイルに対して**［Molecular Feature による化合物の検出］**アルゴリズムを実行します。 | • **［最大化合物の数を制限する］**フィルタでは、抽出される Feature 数は制限されません。定性分析プログラムに表示される化合物数を制限するだけです。<br>• ［定性分析 Molecular Feature］アルゴリズムを用いて、Feature を抽出します。 さらに、Agilent Mass Profiler Professional ソフトウェアを使用すると、さまざまな化合物を比較できます。<br>• **［ファイル］>［エクスポート］>［CEF 形式］**コマンドを使用して、化合物を CEF ファイルにエクスポートすることができます。<br>• ［シーケンスと照らし合わせる］アルゴリズムを使用する場合は、**［MS/MS スペクトルの抽出］**チェックボックスもオンにします。このチェックボックスをオフにすると、列は［化合物リスト］ウィンドウと［化合物同定結果］ウィンドウに表示されません。 |

タスク 5. タンパク質消化物の Molecular Feature Extraction の実行（LC/MS - MS のみ）

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|
| **3** *m/z* 570.7362 イオンの化合物スペクトルを検出し、電荷の状態、質量、イオン種を特定します。 | **a** ［MS スペクトル結果］ウィンドウで、スクロールして *m/z* 570.7362.+3166 のイオンを含むスペクトルを探します。<br>**b** 電荷状態を確認します。<br>**c** イオン種を検出します。<br>**d** ［化合物リスト］ウィンドウでこの化合物を検索します。<br>**e** 質量を確認します。 | • 化合物 4 には、電荷状態が +2 のこのイオンを含むスペクトルがあります。<br>• 質量は 1139.4577 です。イオン種は (M+2H)+2 です。イオン種は［MS スペクトル結果］ウィンドウに表示されます。また［スペクトルピークリスト］ウィンドウの［イオン種］列にも表示されます。 |

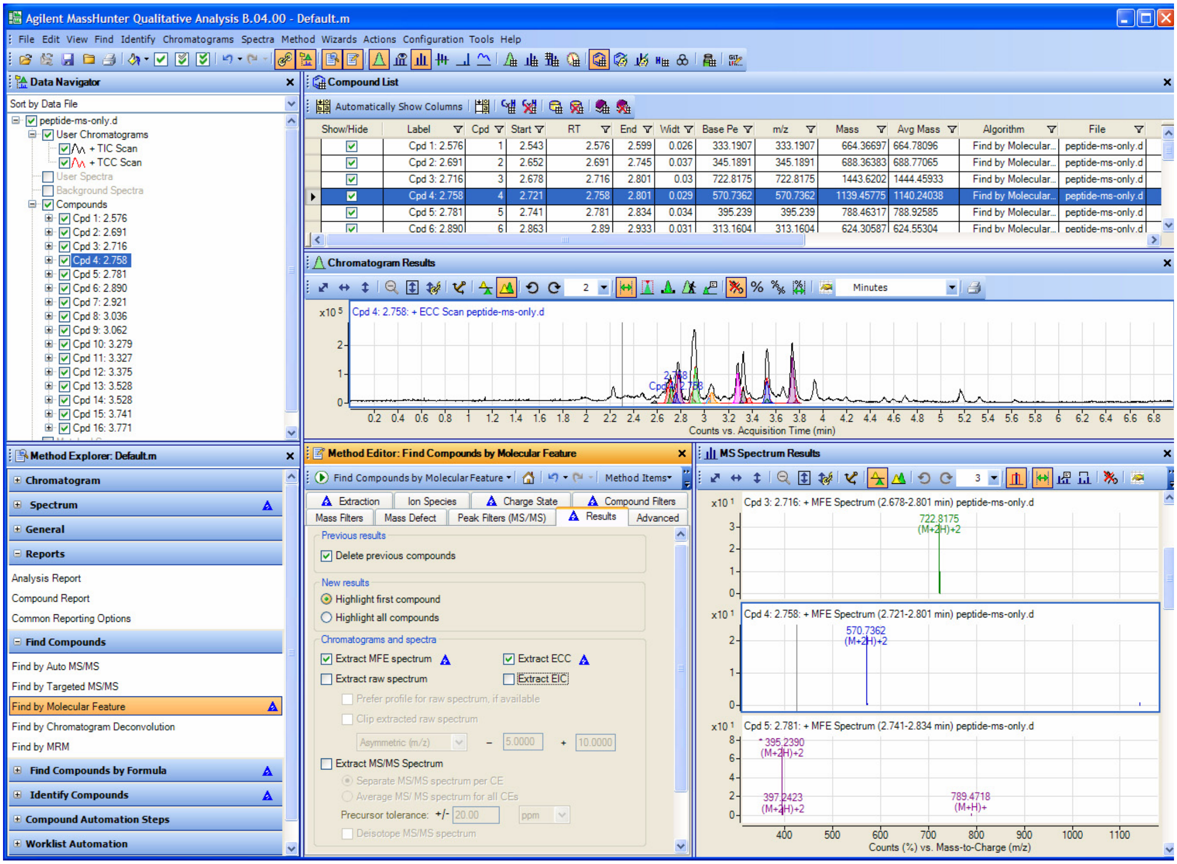
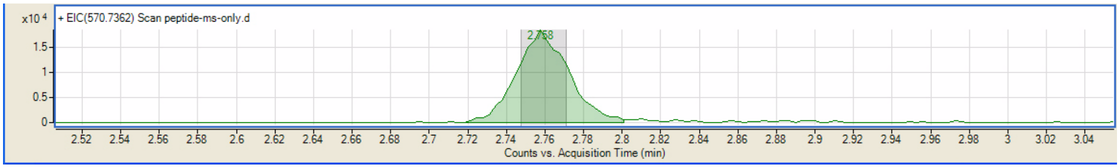


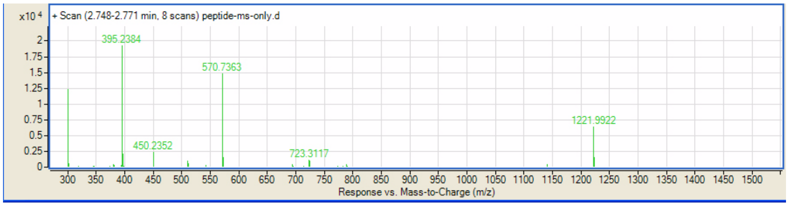

図 73　定性分析の Molecular Feature による化合物の検出

## タスク 5. タンパク質消化物の Molecular Feature Extraction の実行（LC/MS - MS のみ）

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|
| **4** このペプチドで EIC（積分済み）を抽出します。<br>• m/z 値として 570.7362 を使用します。 | **a** データファイルの TIC を右クリックし、**［クロマトグラムの抽出］**をクリックします。<br>**b** **［タイプ］**リストで**［EIC］**を選択します。<br>**c** **［抽出時に積分］**チェックボックスをオンにします。<br>**d** m/z 値として *570.7362* を入力します。<br>**e** **［詳細］**タブをクリックします。<br>**f** **［対称 (ppm)］**を選択し、**［OK］**をクリックします。 | データファイルに対して［このクロマトグラムの m/z の範囲］が適切に設定されている必要があります。この Q-TOF データファイルには、+/- 100 ppm の範囲が適しています。 |
| **5** EIC の最初の積分ピークの平均スペクトルを抽出します。<br>• 最初の積分ピークであると思われる物を拡大します。<br>• 最高ピークを中間点とした範囲を選択します。 | **a** ［クロマトグラム結果］ツールバーの［リストモード］アイコンをクリックします。<br>**b** EIC を右クリックし、カーソルをドラッグして最初の積分ピーク周辺を拡大します。<br>**c** **［範囲選択］**ツールが選択されていることを確認し、ピークトップを中心とした範囲を選択します。 | |




| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|
| | **d** ピークの影の付いた領域をダブルクリックし、平均スペクトルを抽出します。 | |




| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|
| **6** データファイルを閉じます。 | **a** **［ファイル］>［データファイルを閉じる］**をクリックします。<br>**b** 結果の保存を求められたら、**［いいえ］**をクリックします。 | |

# MS/MS データのタスク（LC/MS - Q-TOF、トリプル四重極）

## タスク 1. 化合物の検出（LC/MS - MS と MS/MS）

［化合物の検出］アルゴリズムにより、MS/MS データ中の化合物を同定し、各化合物の平均 MS スペクトルと MS/MS スペクトルを作成します。この機能は、複雑なデータから情報を「採掘」するための簡単な方法です。

タスク 1. 化合物の検出（LC/MS - MS と MS/MS）

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|
| 1 **sulfas-PosAutoMSMS.d** データファイルの TIC を開き、0.2 ～ 1.3 分の範囲を選択します。<br>• 一般ワークフローを使用します。<br>• 0.2 ～ 1.3 分の範囲をハイライトします。 | **a** プログラムが開いていない場合、**［Masshunter 定性分析］**アイコンをダブルクリックします。開いている場合は、**［ファイル］**>**［データファイルを開く］**をクリックします。<br>**b** デモデータファイルのディレクトリの **sulfa-PosAutoMSMS.d** データファイルをクリックし、**［開く］**をクリックします。<br>**c** **［コンフィグレーション］**>**［ワークフローのコンフィグレーション］**>**［一般］**コマンドをクリックします。<br>**d** **［ワークフローのデフォルトメソッドを読み込む］**ボタンと**［ワークフローのデフォルトレイアウトを読み込む］**ボタンをクリックします。<br>**e** **［OK］**ボタンをクリックします。<br>**f** 必要に応じて［クロマトグラム結果］ツールバーの**［範囲選択］**ツールをクリックします。<br>**g** 必要に応じて［クロマトグラム結果］ツールバーの**［ズーム中に Y 軸をオートスケール］**ツールをクリックします。<br>**h** クリック＆ドラッグで、0.2 分～ 1.3 分の範囲を選択します。 | • default.m メソッドが自動的に開きます。別のメソッドを開くには**［メソッド］**>**［開く］**をクリックしてメソッドを選択し、**［開く］**をクリックします。<br>• 青色の三角形が［メソッドエクスプローラ］の［時間の遅れを調整］タブに自動的に表示されます。このデータファイルにはDADデータと ADC データも含まれています。時間の遅れを調整しない場合は、この青色の三角形は無視してかまいません。 |

## タスク 1. 化合物の検出（LC/MS - MS と MS/MS）

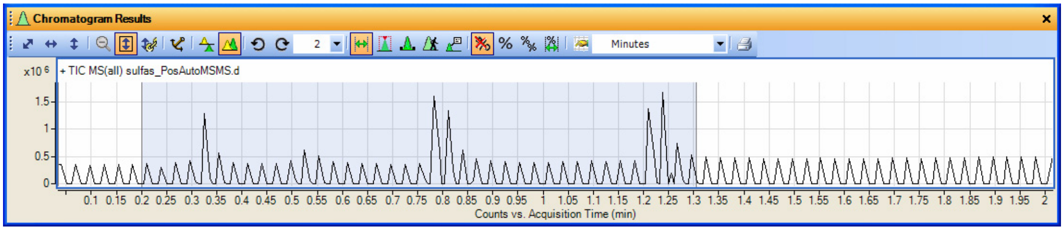



図 74　sulfas-PosAutoMSMS.d データファイルの TIC クロマトグラム - 選択された範囲

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|
| **2**　クロマトグラムの 0.2 ～ 1.3 分から化合物を検出します。<br>• 正の MS/MS TIC スレッショルドに 100,000 を入力します。<br>• 121.0504 と 922.0097 の質量を除外します。 | **a**　［メソッドエクスプローラ］で［**化合物の検出**］>［**自動 MS/MS で検出**］をクリックします。<br>**b**　［処理］タブの［**正の MS/MS TIC スレッショルド**］に、`100000` を入力します。<br>**c**　［**除外する質量**］タブをクリックします。<br>**d**　［**すべての新しいクロマトグラムから質量（または m/z 範囲）を除外する**］をクリックします。<br>**e**　値に `121.0504,922.009` を入力します。<br>**f**　［**対称 (ppm)**］を選択します。<br>**g**　**20** を選択します。 | • 化合物を検出するクロマトグラム範囲を選択します。図 74 を参照してください。<br>• 化合物の完全な結果セットは、化合物の検出後に化合物をハイライトした状態で［**検出**］>［**完全な結果セットを抽出**］メニュー項目を用いて抽出することができます。 |

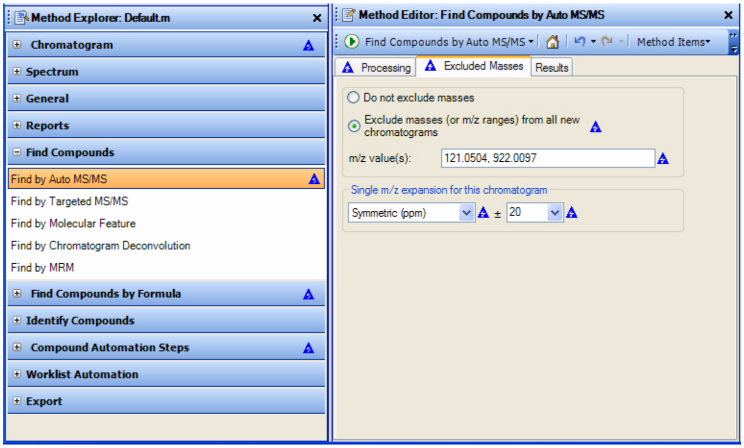



図 75　［自動 MS/MS による化合物の検出］の［除外する質量］タブ

タスク 1. 化合物の検出（LC/MS - MS と MS/MS）

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|
| • EIC、MS スペクトル、MS/MS スペクトルの抽出を選択します。 | **h** ［結果］タブをクリックします。<br>**i** **［EIC の抽出］**、**［MS の抽出］**、および**［MS/MS の抽出］**をチェックをオンにします。<br>**j** **［ECC の抽出］**チェックをオフにします。<br>**k** をクリックして、データファイルに対して**［自動 MS/MS による化合物の検出］**アルゴリズムを実行します。 | • **［検出］>［自動 MS/MS による化合物の検出］>［選択範囲］**から実行することもできます。<br>• 定性分析プログラムにより、この設定では選択範囲から 4 つの化合物が検出されます。<br>• 次のタスクでは、どの化合物がサルファ剤かを同定します。 |
| **3** 化合物 4 のみの MS、MS/MS 両スペクトルを表示します。図 76 を参照してください。 | **a** 化合物 4 のみをハイライトします。<br>**b** メインツールバーの**［ハイライトされた項目のみを表示］**ツールをクリックします。<br>**c** 化合物 4 を展開し、クロマトグラムと 2 つのスペクトルを表示します。［データナビゲータ］ウィンドウの化合物の + サインをクリックして、クロマトグラムとスペクトルのラベルを表示します。 | • MS、MS/MS 両方のスペクトルを表示すると、化合物についてのすべての情報が表示されるため便利です。<br>• プリカーサとプロダクトの両スペクトルが各化合物から抽出されることに注目してください。ひし形のマークはプリカーサイオンを表します。［MS および MS/MS スペクトルの表示オプション］ダイアログボックスから、MS/MS プリカーサイオン記号に使用する色を変更できます。 |

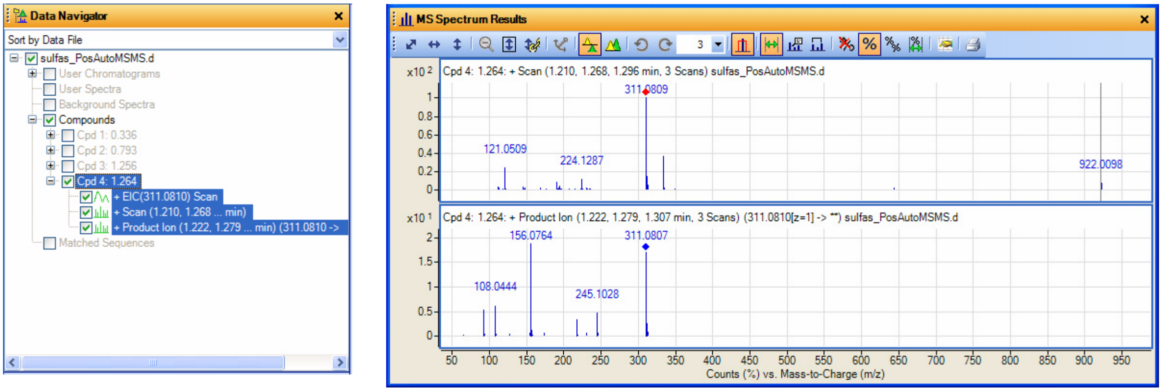



**図 76** 化合物 4 の MS スペクトルと MS/MS スペクトルを表示した［データナビゲータ］ウィンドウと［MS スペクトル結果］ウィンドウ

# タスク 2. 化合物の同定と化学式の推定（LC/MS - MS と MS/MS）

このタスクでは、タスク 1 で検出された化合物の化学式を同定および推定します。

タスク 2. 化合物の同定と化学式の推定（LC/MS - MS と MS/MS）

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|
| **1** 質量に基づき化合物 1 ～ 4 のデータベース検索を行います。112 ページの図 77 を参照してください。 | **a** ［データナビゲータ］ウィンドウのすべての化合物をハイライトします。<br>**b** ［メソッドエクスプローラ］で **［化合物の同定］>［データベース検索］** をクリックします。<br>**c** ［メソッドエディタ］ウィンドウの［検索基準］タブで、**［質量］** をクリックします。<br>**d** メインメニューから **［同定］>［データベースで化合物を検出］** をクリックします。**［データベースで化合物を検索］** アイコン をクリックしてアルゴリズムを実行することもできます。<br>**e** **［表示］>［化合物リスト］** をクリックします。<br>**f** **［表示］>［化合物同定結果］** をクリックします。<br>**g** ［化合物リスト］の化合物 1 ～ 3 の **［表示 / 非表示］** チェックボックスをオンにします。以前のタスクにより化合物 1 ～ 3 は非表示にされていました。あるいは、メインツールバーの **［ハイライトされた項目をすべて表示］** ツールをクリックします。 | • ［化合物リスト］で 3 つのサルファ剤が同定されたことを確認してください（113 ページの図 78 を参照）。<br>• ［データベース検索］アルゴリズムを実行しても、化合物 3 の化合物名は検出されていないことを確認してください。 |

タスク 2. 化合物の同定と化学式の推定（LC/MS - MS と MS/MS）

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|

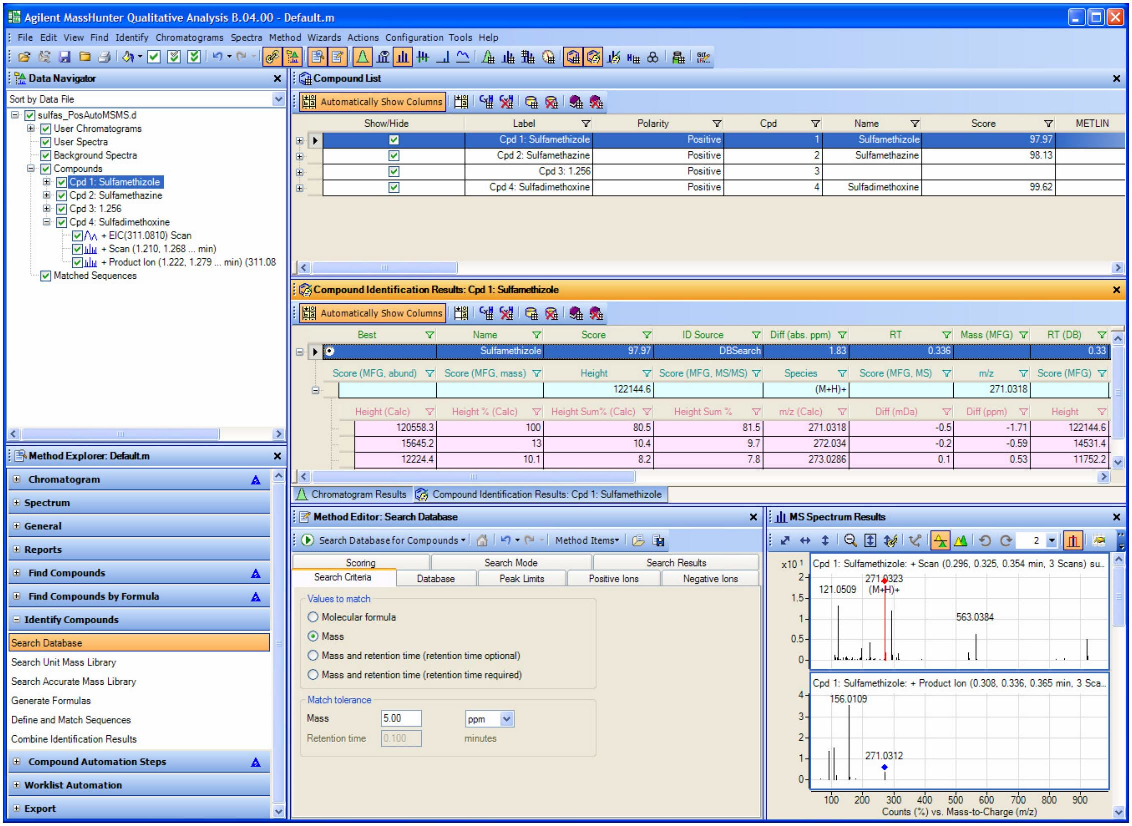



図 77　データベース検索で同定された sulfas-PosAutoMSMS.d データファイルの化合物

タスク 2. 化合物の同定と化学式の推定（LC/MS - MS と MS/MS）

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|
| **2** 化合物 1 ～ 4 の化学式を作成します。<br>• ［化合物リスト］を表示します。<br>• ［化合物同定結果］リストを表示します。<br>• ［MS スペクトル結果］ウィンドウを閉じます。<br><br>ヒント：図 78 と同じ結果を得るためには、同位体モデルに［**一般的な有機分子**］が選択されていることを確認してください。 | **a** ［メソッドエクスプローラ］ウィンドウで、［**化合物の同定**］>［**化学式の作成**］をクリックします。<br>**b** ［**電荷の状態**］タブをクリックし［**一般的な有機分子**］を選択します。<br>**c** 4 つの化合物すべてをハイライトします。<br>**d** ［**化合物から化学式を作成**］ツール（▶）をクリックしてアルゴリズムを実行するか、［**同定**］>［**化合物から化学式を作成**］コマンドをクリックします。<br>**e** ［データナビゲータ］ウィンドウで、表示する化合物をハイライトします。<br>**f** ［化合物同定結果］ウィンドウのスクロールバーを用いて、化学式の作成結果（MFG）を表示します。テーブルの第 2 レベルに複数の［スコア］列が表示されます。［ID ソース］列に、［データベース検索（DB-Search）］アルゴリズムおよび［化学式の作成（MFG）］アルゴリズムの双方により結果が検出されたことが表示されます。 | • デフォルトでは、［化合物同定結果］ウィンドウは［クロマトグラム結果］と同じウィンドウにタブ表示されます。ウィンドウの下にあるタブをクリックし、ウィンドウを切り替えます。<br>• 該当する m/z で拡大すると、スペクトルプロット上に予測同位体存在比が見えます。<br>• すべての化合物に関して 1 つ以上の化学式が検出されます。<br>• ［データを含まない列を隠す］アイコンをクリックすると、自動的に空の列が非表示になります。［列の削除］ショートカットコマンドも使用できます。<br>• データベース検索で検出された化学式は［化学式の作成］アルゴリズムで特定された化学式と同じです。<br>• ［**コンフィグレーション**］>［**化合物ラベルコンフィグレーション**］から化合物ラベルを変更することができます。 |

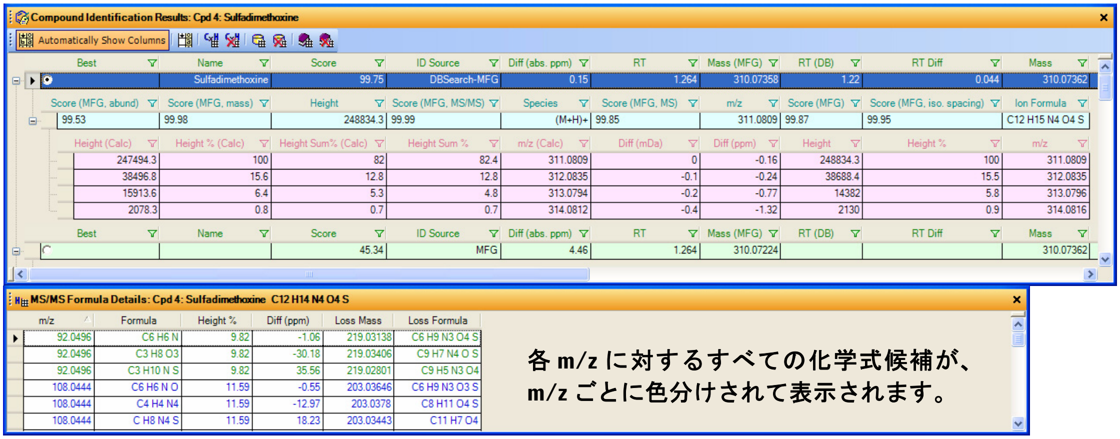



**図 78**　化合物 4 の［化合物同定結果］ウィンドウと［MS/MS 化学式の詳細］ウィンドウ

# タスク 3. 化合物レポートの印刷（LC/MS - MS/MS）

このタスクでは、タスク 1 で検出し、タスク 2 で同定した各化合物のレポートを作成します。

タスク 3. 化合物レポートの印刷（LC/MS - MS/MS）

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|
| **1** 化合物レポートに対するメソッドの選択の一部を変更します。<br>• 必要に応じて、拡大された指定ピークの MS スペクトルの表示をオフにします。<br>• レポートの MS/MS オプションをオンにします。 | **a** ［メソッドエクスプローラ］ウィンドウで、**［レポート］>［化合物レポート］**をクリックします。<br>**b** 必要に応じて、**［MS スペクトルの表示（指定ピークの拡大表示）］**チェックボックスをオフにします。<br>**c** **［MS/MS スペクトルの表示］**と**［MS/MS ピークテーブルの表示］**チェックボックスをオンにします。 | • このタブでオンにしたセクションのみがレポートに含まれます。<br>• レポートの印刷に使用するテンプレートを変更するには、［メソッドエクスプローラ］ウィンドウの**［レポート］>［共通レポートオプション］**をクリックします。レポートに使用する別のテンプレートを選択します。 |

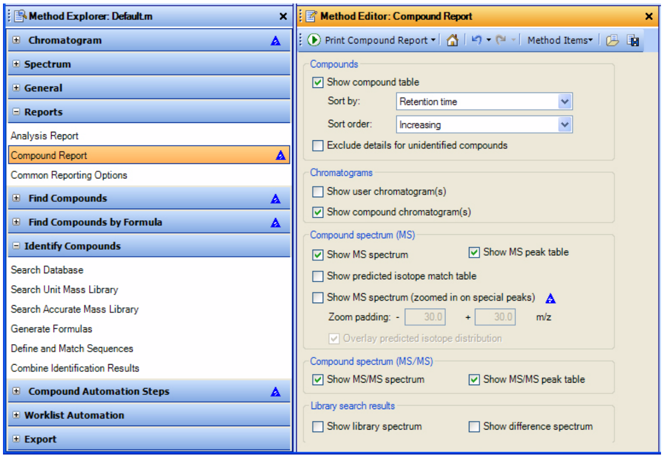
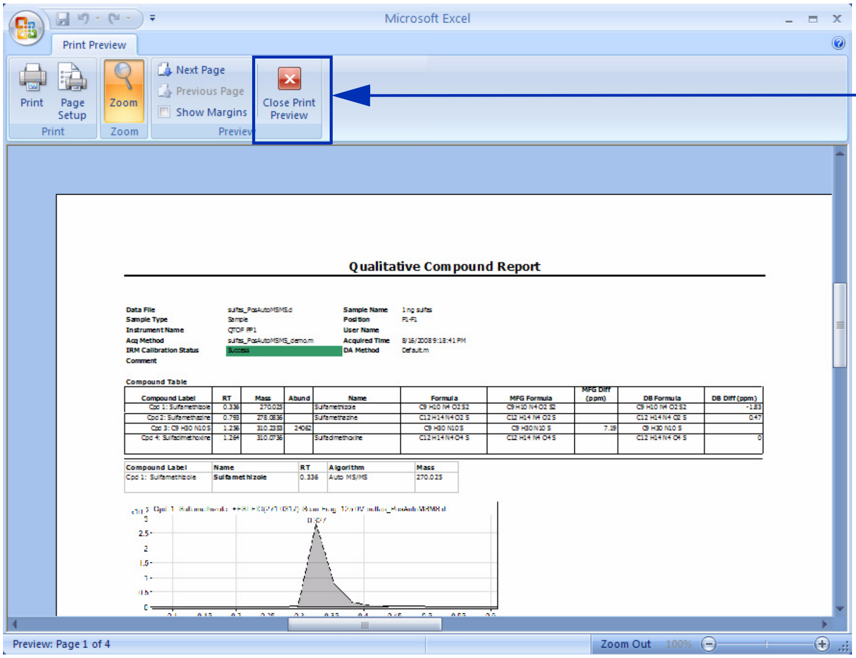



**図 79** ［メソッドエディタ］の［化合物レポート］ウィンドウ

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|
| **2** レポートを印刷します。<br>• レポートをプレビューします。 | **a** **［化合物レポートの印刷］**アイコン をクリックし、レポートを印刷します。<br>**b** ［化合物レポートの印刷］ダイアログボックスで、**［すべての結果］**ボタンをクリックします。<br>**c** **［レポートの印刷］**をオンにします。<br>**d** プリンタを選択します。<br>**e** **［印刷プレビュー］**をオンにします。<br>**f** **［OK］**をクリックします。 | • **［レポートを PDF ファイルで保存］**チェックボックスをオンにすると、PDF ファイルが作成されます。この方法は、Excel のインストール後に Microsoft Excel PDF のアドインをインストールしている場合にのみ使用できます。 |

## タスク 3. 化合物レポートの印刷（LC/MS - MS/MS）

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|




このボタンを押すと、レポートはプリンタに送信されずに［印刷プレビュー］ウィンドウが終了します。

**図 80**　化合物レポートの印刷プレビュー

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|
| **3**［印刷プレビュー］ウィンドウを閉じます。 | **a** ツールバーで［**印刷プレビューを閉じる**］をクリックします。 | • レポートを印刷するには［印刷］ボタンをクリックします。レポートはステップ 2 の［化合物レポートの印刷］ダイアログボックスで選択したプリンタを使用して印刷されます。 |
| **4** 結果を保存せずに、データファイルを閉じます。 | **a**［**ファイル**］>［**データファイルを閉じる**］をクリックします。<br>**b** 結果の保存を求められたら［**いいえ**］をクリックします。 | |

# タスク 4. 化合物の検出と精密質量ライブラリの検索（LC/MS - MS/MS）

[ターゲット MS/MS による化合物の検出] アルゴリズムでは MS/MS データの化合物を同定し、各化合物の MS と MS/MS スペクトルを抽出します。複数のコリジョンエネルギーからの MS/M スペクトルを使用する場合、すべてのコリジョンエネルギーの平均 MS/M スペクトルを抽出したり、各コリジョンエネルギーの MS/M スペクトルを個別に抽出することができます。

[精密質量ライブラリの検索] アルゴリズムではプロダクトイオンスペクトルのライブラリファイル（CDB）を検索できます。セントロイドスペクトルのみが検索できるので、すべてのプロファイルスペクトルは最初にセントロイドスペクトルに変換しておく必要があります。

タスク 4. 化合物の検出と精密質量ライブラリの検索（LC/MS - MS/MS）

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
| --- | --- | --- |
| 1 **sulfas-PosAutoMSMS.d** データファイルの TIC を開きます。<br>• 一般ワークフローを使用します。 | a プログラムが開いていない場合、[**Masshunter 定性分析**] アイコンをダブルクリックします。[データファイルを開く] ダイアログボックスで [**キャンセル**] をクリックします。<br>b [**コンフィグレーション**] > [**ワークフローのコンフィグレーション**] > [**一般**] コマンドをクリックします。<br>c [**OK**] をクリックします。<br>d [**ファイル**] > [**データファイルを開く**] をクリックします。<br>e [**sulfa-PosTargetedMSMS.d**] をクリックし [**開く**] をクリックします。<br>f 必要に応じて、[クロマトグラム結果] ツールバーの [**ピーク選択**] アイコンをクリックします。<br>g 必要に応じて、[クロマトグラム結果] ツールバーの [**ズーム中に Y 軸をオートスケール**] アイコンをクリックします。 | • [**ワークフローのデフォルトメソッドを読み込む**] ボタンと [**ワークフローのデフォルトレイアウトを読み込む**] ボタンをクリックします。<br>• 別のメソッドを開くには [**メソッド**] > [**開く**] をクリックしてメソッドを選択し、[**開く**] をクリックします。<br>• 青色の三角形が [メソッドエクスプローラ] の [時間の遅れを調整] タブに自動的に表示されます。このデータファイルにはDADデータと ADC データも含まれています。時間の遅れを調整しない場合は、この青色の三角形は無視してかまいません。 |

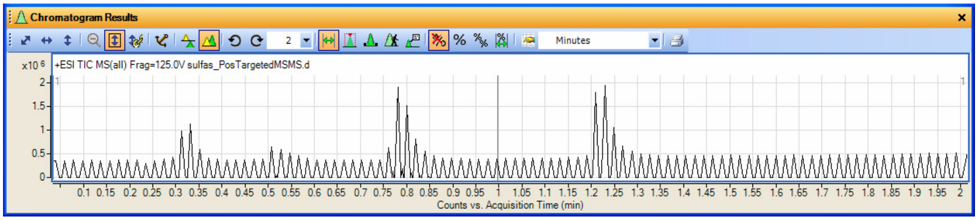



**図 81** sulfas-PosTargetedMSMS.d データファイルの TIC クロマトグラム

タスク 4. 化合物の検出と精密質量ライブラリの検索（LC/MS - MS/MS）

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|
| **2** ターゲット MS/MS アルゴリズムを使用して化合物を検出します。<br>• MS/MS クロマトグラムと MS/MS スペクトルの抽出を選択します。 | **a** ［メソッドエクスプローラ］ウィンドウで、**［化合物の検出］>［ターゲット MS/MS による検出］**をクリックします。<br>**b** **［結果］**タブをクリックします。<br>**c** **［MS/MS クロマトグラムの抽出］**と**［MS/MS スペクトルの抽出］**のチェックボックスをオンにします。<br>**d** **［検出］>［ターゲット MS/MS による化合物の検出］**をクリックします。 | • 化合物の完全な結果セットは、化合物の検出後に化合物をハイライトした状態で**［検出］>［完全な結果セットを抽出］**メニュー項目を用いて抽出することができます。<br>• 定性分析プログラムにより、この設定では 4 つの化合物が検出されます。 |
| **3** ［精密質量ライブラリの検索］アルゴリズムを使用して各化合物を検索します。<br>• Sulfas_AM_PCDL.cdb ライブラリを選択します。<br>• このライブラリが使用できない場合は、Personal Compound Database and Library（PCDL）プログラムをインストールしてください。<br>• 最小一致スコアを 50 に下げます。 | **a** ［メソッドエクスプローラ］ウィンドウで、**［化合物の同定］>［精密質量ライブラリの検索］**をクリックします。<br>**b** ［参照］ボタンをクリックします。<br>**c** **［Sulfas_AM_PCDL.cdb］**を選択します。<br>**d** **［開く］**ボタンをクリックします。<br>**e** **［検索結果］**タブをクリックします。<br>**f** **［最小 Reverse スコア］**ボックスに 50 を入力します。<br>**g** ［データナビゲータ］ウィンドウのすべての化合物をハイライトします。<br>**h** **［同定］>［ライブラリで化合物を検索］**をクリックします。<br>**i** **［表示］>［化合物リスト］**をクリックします。<br>**j** **［表示］>［化合物同定結果］**をクリックします。 | • 拡張子が *CDB* のライブラリを選択している場合、ライブラリを検索すると［精密質量ライブラリの検索］アルゴリズムが実行されます。拡張子が *L* のライブラリを選択した場合、ライブラリを検索すると［ユニットマスライブラリの検索］アルゴリズムが実行されます。<br>• ［データナビゲータ］ウィンドウで化合物を右クリックして、**［ライブラリで化合物を検索］**をクリックして実行することもできます。<br>• ［精密質量ライブラリの検索］アルゴリズムに関係するすべてのパラメータを表示するには、［ユーザーインターフェイス コンフィグレーション］ダイアログボックスから［詳細パラメータの表示］チェックボックスをオンにします。［検索基準］タブが表示されます。このタブは、イオン化モード、機器タイプ、コリジョンエネルギーによって検索するライブラリエントリを絞り込む際に使用します。 |

タスク 4. 化合物の検出と精密質量ライブラリの検索（LC/MS - MS/MS）

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|

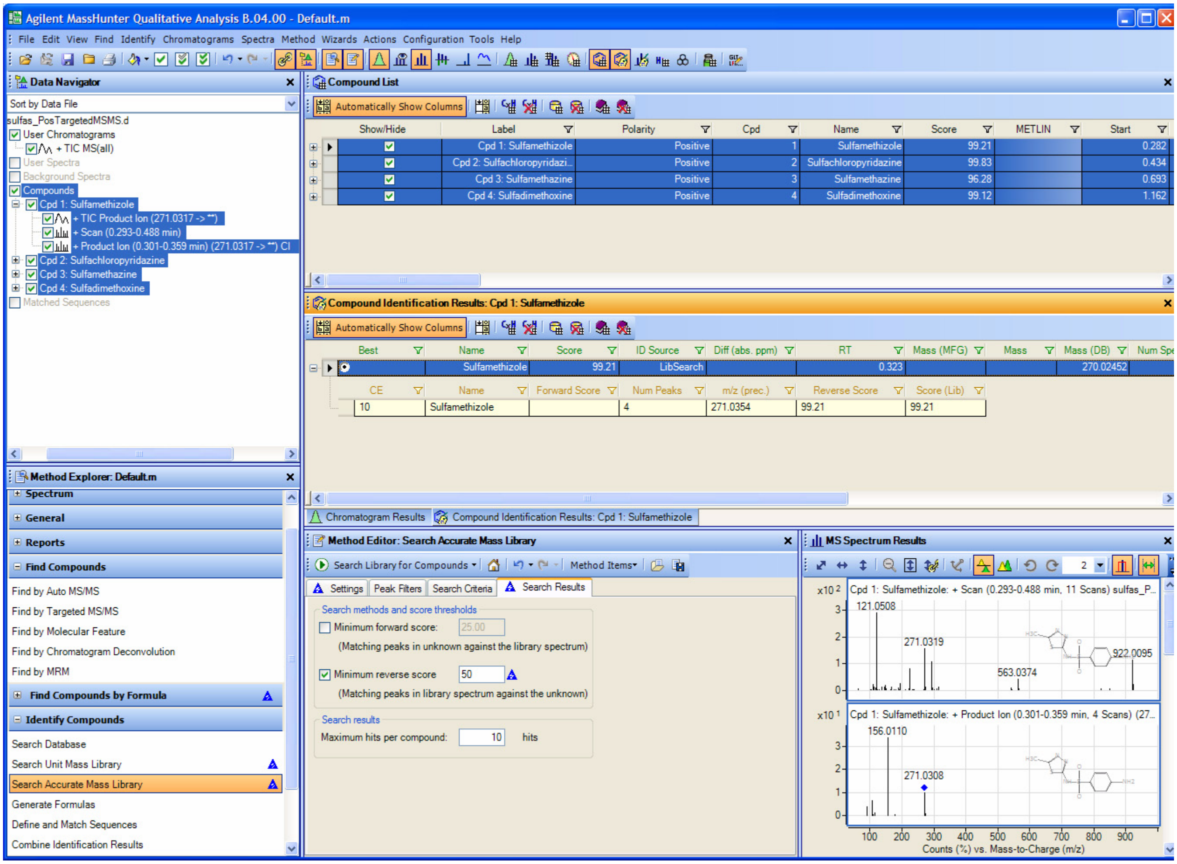



図 82 ［精密質量ライブラリの検索］アルゴリズムの実行結果

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|
| 4 結果を保存せずに、データファイルを閉じます。 | a ［ファイル］>［データファイルを閉じる］をクリックします。<br>b 結果の保存を求められたら［いいえ］をクリックします。 | |

# タスク 5. タンパク質消化物の Molecular Feature Extraction の実行（LC/MS - MS と MS/MS）

このタスクでは［自動 MS/MS］モードの Q-TOF で得られたタンパク質消化物データの Molecular Feature Extraction を実行します。

タスク 5. タンパク質消化物の Molecular Feature Extraction の実行（LC/MS - MS と MS/MS）

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|
| **1** 以下のパラメータを用いて、データファイル **peptide-auto.d** の Molecular Feature Extraction を行います。<br>• レイアウトがデフォルトレイアウトに戻っていることを確認します。<br>• 時間範囲は 2.5 ～ 4 分です。<br>• 同位体モデルにペプチドを設定します。<br>• アバンダンスの最大 20 化合物のみを表示するようにフィルタをかけます。<br>• ウィンドウレイアウトを変更し、図 83（次ページ）に合わせます。 | **a** **peptide-auto.d** データファイルを開きます。<br>**b** **［コンフィグレーション］**> **［ワークフローのコンフィグレーション］**> **［一般］** コマンドをクリックします。<br>**c** **［OK］** をクリックします。<br>**d** ［メソッドエクスプローラ］で **［化合物の検出］**> **［Molecular Feature による検出］** をクリックし、［メソッドエディタ］ウィンドウにパラメータを表示します。<br>**e** **［抽出］** タブで ［ターゲット］のデータタイプに **［低分子 ( クロマトグラフ )］** を選択します。<br>**f** **［リテンションタイムの制限］** チェックボックスをオンにします。次に `2.5 - 4` を入力します。<br>**g** **［電荷の状態］** タブで **［同位体モデル］** に **［ペプチド］** を選択します。<br>**h** **［化合物フィルタ］** タブで、**［最大化合物の数を制限する］** チェックボックスをオンにし、化合物数に `20` を入力します。<br>**i** ［結果］タブで **［MFE スペクトルの抽出］** と **［ECC の抽出］** チェックボックスをオンにします。<br>**j** をクリックして、データファイルに対して **［Molecular Feature による化合物の検出］** アルゴリズムを実行します。<br>**k** ［クロマトグラム結果］ツールバーの ［リストモード］ツールをクリックします。<br>**l** 必要に応じて ［クロマトグラム結果］ツールバーの **［リストペインの最大数］** で **3** を選択します。 | • デフォルトレイアウトに戻すには、**［コンフィグレーション］**> **［ウィンドウレイアウト］**> **［デフォルトレイアウトの復元］** をクリックします。<br>• **［最大化合物の数を制限する］** フィルタでは、抽出される Feature 数は制限されません。定性分析プログラムに表示される化合物数を制限するだけです。<br>• **［同位体モデル］** のリストにペプチドがない場合は、［ユーザーインターフェイス コンフィグレーション］ダイアログボックスで **［Peptide Sequence Editor］** チェックボックスをオンにして、この機能を有効にします。**［コンフィグレーション］**> **［ユーザーインターフェイス コンフィグレーション］** をクリックして、このダイアログボックスを表示します。［Molecular Feature による検出］セクションの ［LMFE］タブおよび［詳細］タブを表示するには、**［詳細パラメータの表示］** チェックボックスをオンにします。<br>• ［Molecular Feature］アルゴリズムを用いて、Feature を抽出します。この後、Agilent MassHunter Profiling ソフトウェアまたは GeneSpring MS ソフトウェアを用いて、異なる抽出からのデータを比較できます。<br>• デフォルトでは、クロマトグラムは重ね描きで表示されます。 |
| **2** *m/z* 625.31585 イオンの化合物スペクトルを検出し、電荷状態を確認します。 | **a** ［MSスペクトル結果］ウィンドウで、スクロールして *m/z* 625.3166 のイオンを含むスペクトルを探します。<br>**b** 電荷状態を確認します。 | • 化合物 7 には、電荷状態が +1 のこのイオンを含むスペクトルがあります。 |

タスク 5. タンパク質消化物の Molecular Feature Extraction の実行（LC/MS - MS と MS/MS）

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|

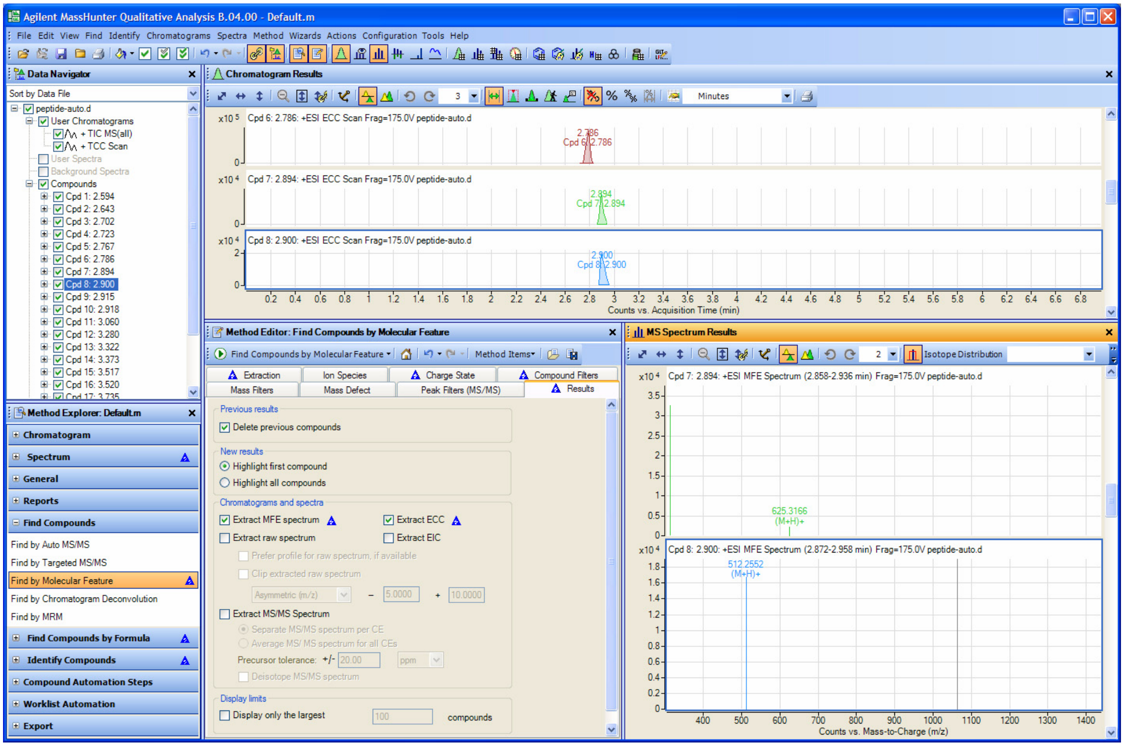



図 83　自動 MS/MS データを用いたタンパク質消化物の Molecular Feature による化合物の検出

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|
| **3** 結果を保存せずに、データファイルを閉じます。 | **a** ［ファイル］>［データファイルを閉じる］をクリックします。<br>**b** 結果の保存を求められたら［いいえ］をクリックします。 | |

# GC-MS データのタスク（トリプル四重極）

## タスク 1. クロマトグラムデコンボリューションによる化合物の検出（GC/MS）

この化合物の検出アルゴリズムでは GC/MS データの化合物を同定し、各化合物の補正 MS スペクトルを作成できます。この機能は、複雑なデータから情報を「採掘」するための簡単な方法です。［クロマトグラム デコンボリューションによる化合物の検出］アルゴリズムは、スキャンモード、プロダクトイオンスキャンモード、またはニュートラルロススキャンモードで取得された GC/MS サンプルデータでのみ使用できます。

タスク 1. クロマトグラムデコンボリューションを使用した化合物の検出（GC/MS）

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|
| 1 **Pest - 200 - Scan.d**データファイルの TIC を開きます。 | a プログラムが開いていない場合、［**Masshunter 定性分析**］アイコンをダブルクリックします。開いている場合は、［**ファイル**］>［**データファイルを開く**］をクリックします。<br>b **GCMS** デモデータファイルフォルダの **Pest - 200 - Scan.d** データファイルをクリックします。<br>c ［**結果データの読み込み**］チェックボックスをオフにして［**開く**］をクリックします。 | • GC/MS データの作業で使用できるのは一般ワークフローのみです。 |

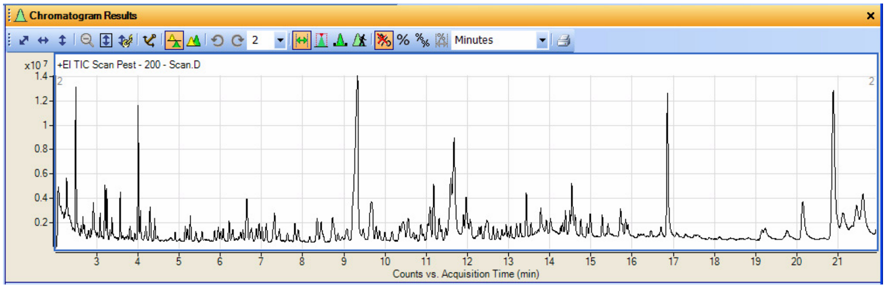



**図 84** Pest - 200 - Scan.d の TIC クロマトグラム

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|
| 2 GC データを使用するようにユーザーインターフェイスをコンフィグレーションします。 | • タスク 17. GC のユーザーインターフェイスのコンフィグレーション 69 ページを参照します。 | |

タスク 1. クロマトグラムデコンボリューションを使用した化合物の検出（GC/MS）

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|
| **3** クロマトグラムデコンボリューションアルゴリズムを使用して化合物を検出します。<br>• インテグレータに［Agile］を選択します。<br>• SNR スレッショルドに 20 を入力します。 | **a**［メソッドエクスプローラ］ウィンドウで、**［クロマトグラム］>［積分 (MS)］**を選択します。<br>**b**［インテグレータ選択］リストで［Agile］を選択します。<br>**c** **［化合物の検出］>［クロマトグラムデコンボリューションによる検索］を選択します。**<br>**d**［設定］タブの［ピークフィルタ］で、**［SNR スレッショルド］**に 20 を入力します。 | • 化合物を検出するクロマトグラム範囲を選択します。<br>• 化合物の完全な結果セットは、化合物の検出後に化合物をハイライトした状態で**［検出］>［完全な結果セットを抽出］**メニュー項目を用いて抽出することができます。 |

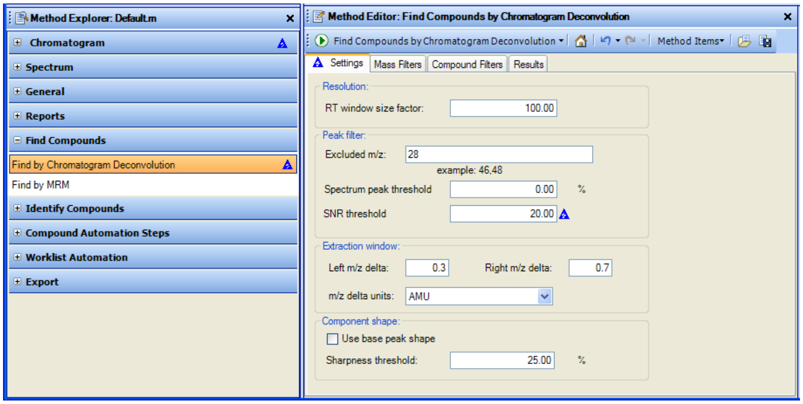



**図 85**　［クロマトグラムデコンボリューションによる検索］の［設定］タブ

| | | |
|---|---|---|
| • EIC、ECC、補正スペクトル、生スペクトルの抽出を選択します。 | **e**［結果］タブをクリックします。<br>**f** **［EIC の抽出］、［ECC の抽出］、［補正スペクトルの抽出］、［生のスペクトルを抽出］**チェックボックスをオンにします。<br>**g** （アイコン）をクリックして、データファイルに対して**［クロマトグラムデコンボリューションによる化合物の検出］**アルゴリズムを実行します。<br>**h** **［表示］>［化合物リスト］**コマンドをクリックします。 | • 定性分析プログラムにより、この設定では 132 の化合物が検出されます。<br>• 次のタスクでは、*NIST08.L* ライブラリを検索して化合物を同定します。 |

### タスク 1. クロマトグラムデコンボリューションを使用した化合物の検出（GC/MS）

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|
| **4** 化合物を確認します。図 76 を参照してください。 | **a** ［MS スペクトル結果］ツールバーの［**リストペインの最大数**］で **2** を選択します。<br>**b** ［化合物リスト］ウィンドウの［データを含まない列を隠す］アイコンをクリックします。<br>**c** ［データナビゲータ］ウィンドウで最初の化合物をクリックします。<br>**d** ［データナビゲータ］ウィンドウでは、矢印キーを使用して化合物を切り替えることができます。 | • MS、MS/MS 両方のスペクトルを表示すると、化合物についてのすべての情報が表示されるため便利です。<br>• 補正スペクトルと生スペクトルの両方が表示されます。 |

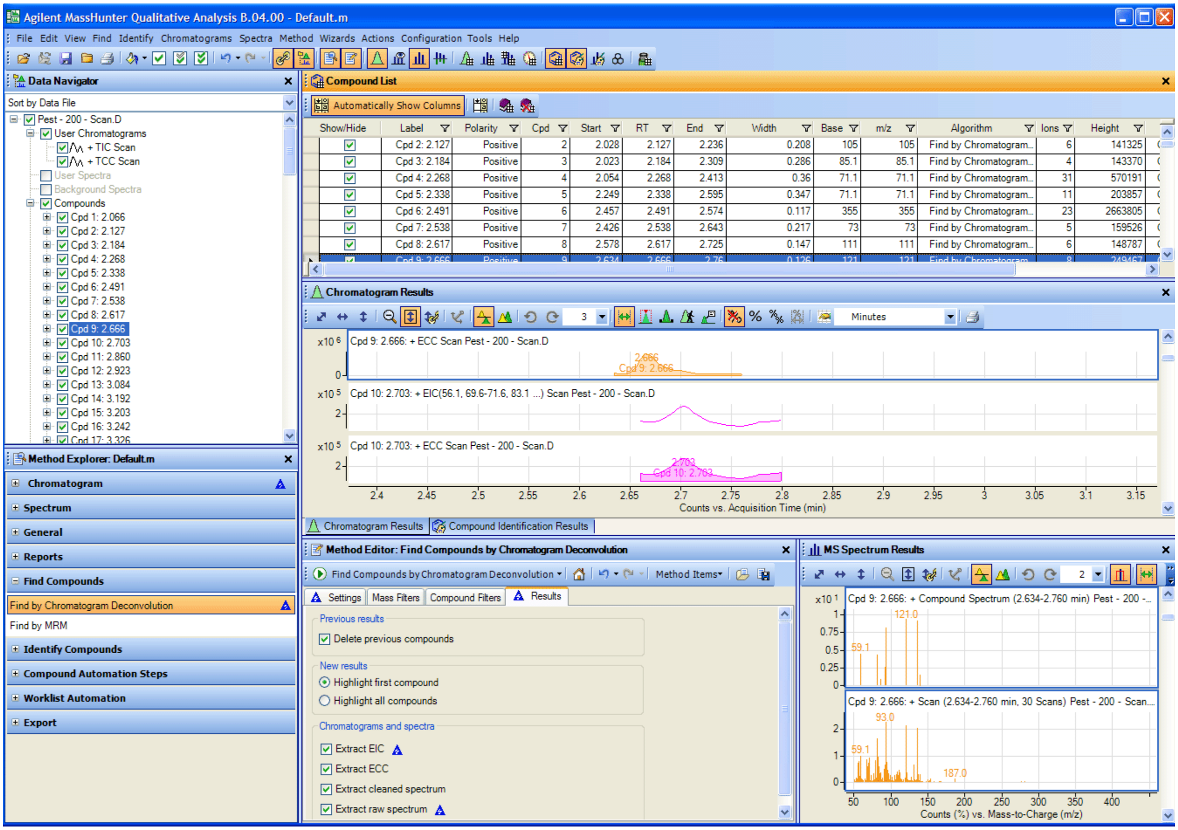



図 86　クロマトグラムデコンボリューション結果

# タスク 2. ライブラリ検索アルゴリズムによる化合物の同定（GC/MS）

このタスクでは、タスク 1. クロマトグラムデコンボリューションによる化合物の検出（GC/MS） 121 ページ で検出された化合物を同定し、化学式を推定します。購入した *NIST08.l* ライブラリ、または *demo.l* ライブラリを使用してこのタスクを実行することができます。

タスク 2. ライブラリ検索アルゴリズムによる化合物の同定（GC/MS）

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|
| 1 すべての化合物に対してライブラリ検索を実行します。 | **a** ［データナビゲータ］ウィンドウのすべての化合物をハイライトします。<br>**b** ［メソッドエクスプローラ］ウィンドウで、**［化合物の同定］** > **［ユニットマスライブラリの検索］** をクリックします。<br>**c** ［設定］タブで ［...］ ボタンをクリックします。**NIST08.l** ライブラリを選択し、**［OK］** ボタンをクリックします。<br>**d** メインメニューで ［同定］ > **［ライブラリで化合物を検索］** をクリックします。 **［ライブラリで化合物を検索］** アイコン をクリックしてアルゴリズムを実行することもできます。<br>**e** **［表示］** > **［結果の差］** をクリックします。<br>**f** **［表示］** > **［構造式ビューア］** をクリックします。<br>**g** 必要に応じて ［表示］ > ［化合物同定結果］ をクリックしウィンドウを表示させます。<br>**h** 必要に応じて、**［化合物同定結果］** タブをクリックします。このウィンドウは、［クロマトグラム結果］ と同じウィンドウにタブ表示されます。<br>**i** ［化合物同定結果］ツールバーの［データを含まない列を隠す］アイコンをクリックします。 | • 多くの化合物は、*NIST08.l* ライブラリ検索により同定されます。<br>• *NIST08.l* ライブラリがない場合は、*demo.l* ライブラリを選択します。<br>• XML ライブラリがある場合、MS/MS スペクトルに対してライブラリの検索アルゴリズムを使用できます。定性分析プログラムの購入時に付属する PCDL プログラムを使用して、XML ライブラリの作成および編集を行うことができます。詳細は、PCDL プログラムのオンラインヘルプを参照してください。 |

タスク 2. ライブラリ検索アルゴリズムによる化合物の同定（GC/MS）

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|

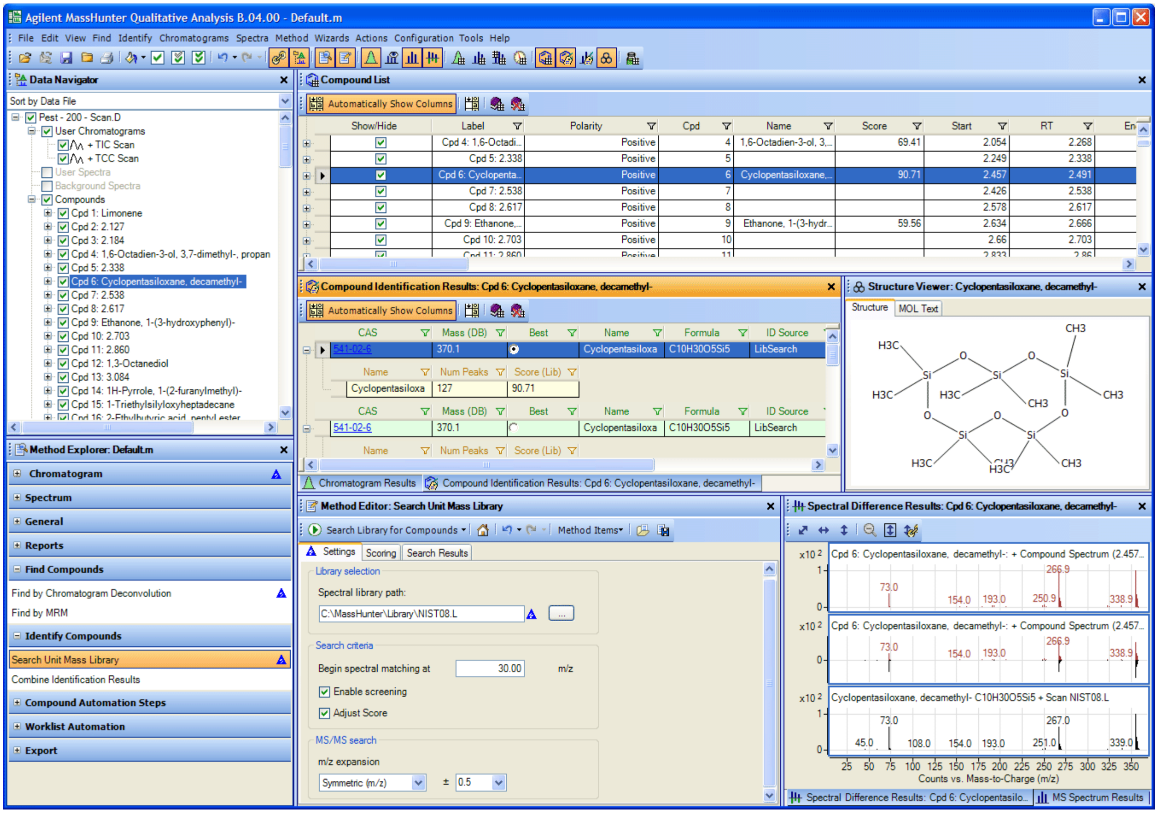


図 87　Pest - 200 - Scan.D データファイルの化合物とライブラリ検索結果

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|
| 2 データファイルを閉じ、LC/MS/MS のユーザーインターフェイス コンフィグレーションに戻ります。 | a ［ファイル］>［データファイルを閉じる］をクリックします。<br>b すべてのファイルを選択します。<br>c ［閉じる］をクリックします。<br>d ［コンフィグレーション］>［ユーザーインターフェイス コンフィグレーション］をクリックします。<br>e すべてのチェックボックスをオンにします。<br>f ［OK］をクリックします。 | • これらのチェックボックスをオンにしないと、アルゴリズムの一部が使用できなくなります。 |

# タスク 3. MRM による化合物の検出（GC/MS - MRM のみ）

［MRM による化合物の検出］アルゴリズムは、GC/MRM データの化合物を同定します。アルゴリズムは、MRM トランジションを使用して化合物を検索します。測定メソッドにあるすべての化合物が抽出され、化合物リストに表示されます。化合物は、クロマトグラムの積分結果にもとづき消去されることはありません。MRM トランジションを使用して測定されたデータに使用できるアルゴリズムは［MRM による化合物の検出］のみです。

タスク 3. MRM を使用した化合物の検出（GC/MS - MRM のみ）

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|
| 1 **Pest - STD 200 MRM.d** データファイルの TIC を開きます。 | **a** プログラムが開いていない場合、**［Masshunter 定性分析］**アイコンをダブルクリックします。開いている場合は、**［ファイル］> ［データファイルを開く］**をクリックします。<br>**b** **GCMS** デモデータファイルフォルダの **Pest - STD 200 MRM.d** データファイルをクリックします。<br>**c** **［結果データの読み込み］**チェックボックスをオフにして**［開く］**をクリックします。 | • GC/MS データの作業で使用できるのは一般ワークフローのみです。 |

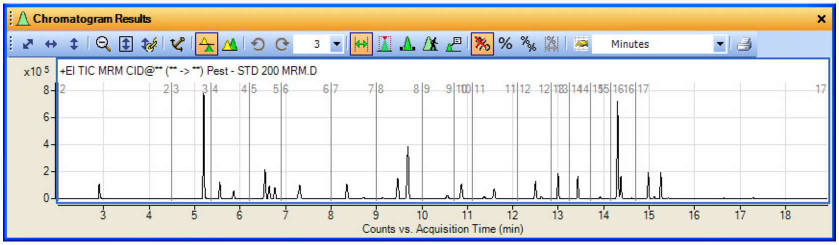



**図 88** Pest - STD 200 MRM.d の TIC クロマトグラム

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|
| 2 GC データを使用するようにユーザーインターフェイスをコンフィグレーションします。 | • 69 ページの「タスク 17. GC のユーザーインターフェイスのコンフィグレーション」ページを参照します。 | |
| 3 MRM アルゴリズムを使用して化合物を検出します。 | **a** ［メソッドエクスプローラ］ウィンドウで、**［化合物の検出］> ［MRM による検出］**を選択します。<br>**b** **［化合物名によるグループトランジション］**ボタンをクリックします。<br>**c** **［積分］**タブをクリックします。<br>**d** インテグレータに**［Agile］**を選択します。 | • 化合物を検出するクロマトグラム範囲を選択します。<br>• 化合物の完全な結果セットは、化合物の検出後に化合物をハイライトした状態で**［検出］> ［完全な結果セットを抽出］**メニュー項目を用いて抽出することができます。 |

タスク 3. MRM を使用した化合物の検出（GC/MS - MRM のみ）

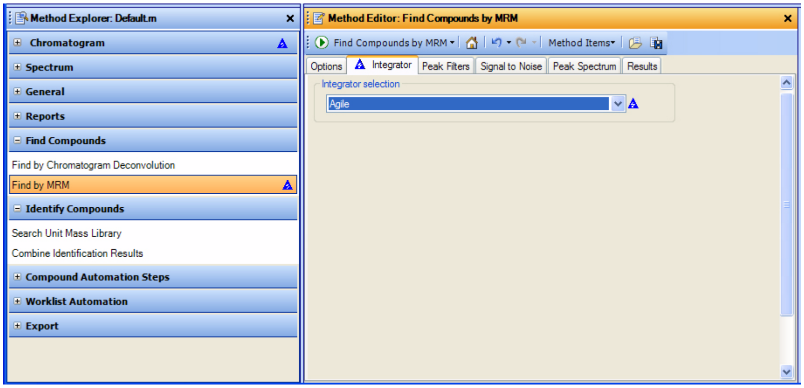



**図 89**　［メソッドエディタ］の［MRM による検出］セクションの［積分］タブ

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
| --- | --- | --- |
| | **e** をクリックして、データファイルに対して［**MRM による化合物の検出**］アルゴリズムを実行します。<br>**f** 必要に応じて、［**表示**］>［**化合物リスト**］コマンドをクリックします。<br>**g** ［**表示**］>［**化合物同定結果**］をクリックしウィンドウを開きます。 | • 定性分析プログラムにより、この設定では 28 の化合物が検出されます。<br>• 次のタスクでは、*NIST08.L* ライブラリを検索して化合物を同定します。 |
| **4** 化合物を確認します。図 76 を参照してください。 | **a** ［MS スペクトル結果］ツールバーの［**リストペインの最大数**］で **2** を選択します。<br>**b** ［化合物リスト］および［化合物同定結果］ウィンドウで、［データを含まない列を隠す］アイコンをクリックします。<br>**c** ［データナビゲータ］ウィンドウで最初の化合物をクリックします。<br>**d** ［データナビゲータ］ウィンドウでは、矢印キーを使用して化合物を切り替えることができます。 | • プリカーサイオンが［プリカーサ（測定）］列に表示され、プロダクトイオンが［化合物同定結果］ウィンドウの［MRM 検索のプロダクトイオン］列に表示されます。 |

タスク 3. MRM を使用した化合物の検出（GC/MS - MRM のみ）

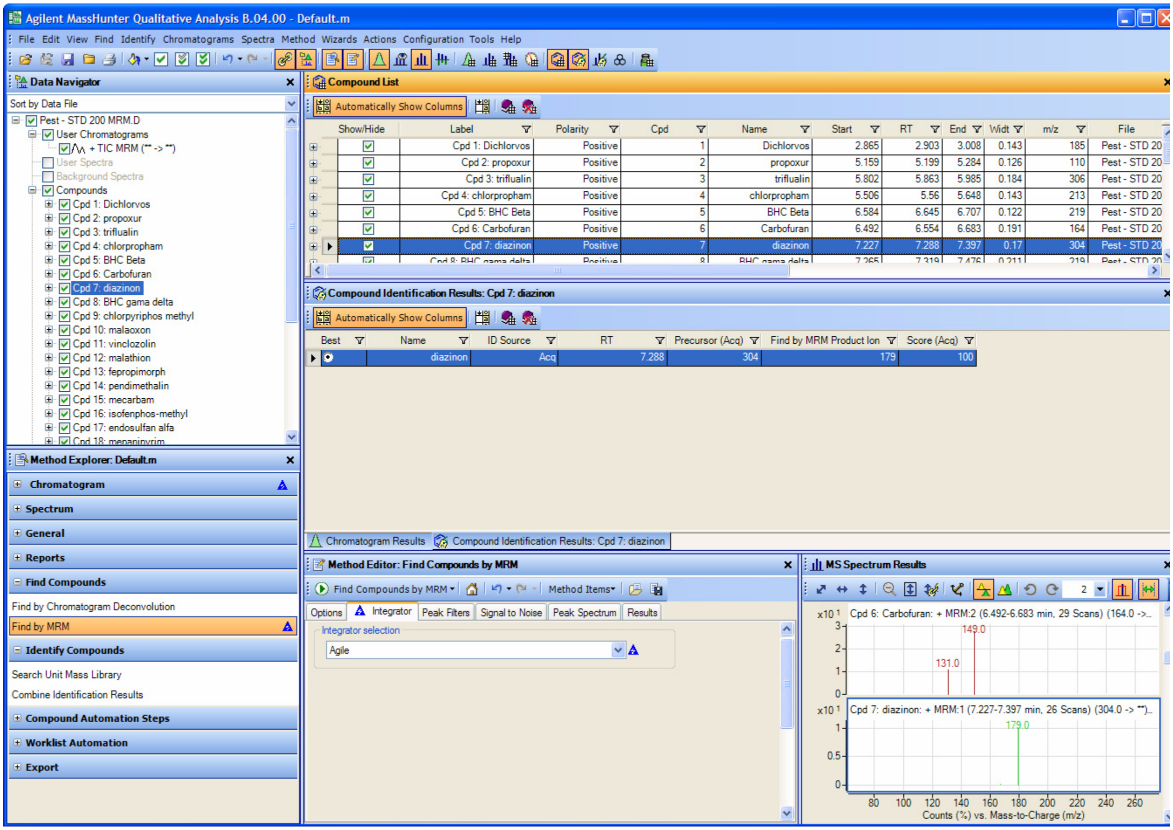



図 90　MRM による検出の結果

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|
| 5　データファイルを閉じ、LC/MS/MS のユーザーインターフェイス コンフィグレーションに戻ります。 | a　［ファイル］>［データファイルを閉じる］をクリックします。<br>b　すべてのファイルを選択します。<br>c　［閉じる］をクリックします。<br>d　［コンフィグレーション］>［ユーザーインターフェイス コンフィグレーション］をクリックします。<br>e　すべてのチェックボックスをオンにします。<br>f　［OK］をクリックします。 | • これらのチェックボックスをオンにしないと、アルゴリズムの一部が使用できなくなります。 |

# 実習 3
# ワークフローを使用した定性分析メソッドの設定と実行

タスク 1. 一般ワークフローの定性分析メソッドの設定と実行　130
タスク 2. クロマトグラムピーク調査ワークフローの自動解析メソッドの設定と実行　136
タスク 3. MS ターゲット化合物のスクリーニングワークフローで化合物同定を自動化するメソッドの設定と実行　142
タスク 4. ワークリストで実行する定性メソッドの設定　147

これらのタスクでは、定性分析メソッドの設定および実行方法を学習します。また、解析や化合物同定を自動化するためのメソッド編集も学習します。その後、データファイルを開くときに、メソッドから自動的に処理を実行します。そして、ワークリストを用いて自動化を実行するメソッドの作成も学習します。

定性分析パラメータのみ、または測定パラメータと定性分析パラメータの両方を用いたワークリストメソッドの作成方法を学習します。

説明には、MS のみのデータファイル（Q-TOF）を使用しますが、すべてのタスクは Q-TOF またはトリプル四重極のどちらの MS/MS データにも適用できます。

この章の例ではいくつかのワークフローを使用します。さまざまなワークフローの概要を把握して、実行するタスクに最も適したワークフローを決定することができます。詳細は、171 ページの「ワークフロー」 を参照してください。

一般ワークフローは GC/MS データと LC/MS データの両方をサポートします。他のワークフローでサポートされるのは LC/MS データのみです。

BioConfirm ワークフローについては、オンラインヘルプ、ならびに『BioConfirm Quick Start Guide』および『BioConfirm Familiarization Guide』を参照してください。

実習方法を示す表は、以下の 3 列に分けて表示されています。

- ステップ - 操作概要です。各自でプログラムを実行します。
- 詳細説明 - ステップの実行に必要な手順を示しています。
- コメント - 実習の各ステップに関するヒントや追加情報を記しています。

## タスク 1. 一般ワークフローの定性分析メソッドの設定と実行

定性分析プログラムを初めて起動した場合、default.m メソッドが読み込まれます。開いたメソッドは変更して保存したり、新しいメソッドを開き、変更を加えて保存したりすることができます。default.m メソッドを上書きすることはできません。

データファイルを開いた際に、メソッドで特定の処理を実行するように設定することもできます。データファイルを開く際に、データファイルに保存されている結果の作成に使用したメソッドを読み込むこともできます。データファイルに結果を保存するたびに、このメソッドは自動的に保存されます。一般ワークフローは、GC/MS データファイルと LC/MS データファイルの両方で使用できます。

タスク 1. 定性分析メソッドの設定と実行

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
| --- | --- | --- |
| **1** **sulfas_PosMS.d** データファイルを開きます。<br>• データファイルが開かれたときに、プログラムによる自動ファイル処理が実行されないことを確認します。<br>• メソッドが Default.m であることを確認します。<br>• ウィンドウレイアウトがデフォルトレイアウトであることを確認します。 | **a** デスクトップの［**Qualitative Analysis B.04.00**］アイコンをダブルクリックします。<br>**b** ［データファイルを開く］ダイアログボックスで **sulfas_PosMS.d** を選択します。<br>**c** ［**選択したメソッドでファイルを開くときにする処理を実行**］チェックボックスをオフにします。<br>**d** 必要に応じて［**結果データの読み込み**］チェックボックスをオフにします。<br>**e** ［**開く**］をクリックします。<br>**f** ［**コンフィグレーション**］>［**ワークフローのコンフィグレーション**］>［**一般**］コマンドをクリックします。<br>**g** ［**ワークフローのデフォルトメソッドを読み込む**］ボタンと［**ワークフローのデフォルトレイアウトを読み込む**］ボタンをクリックします。<br>**h** ［**OK**］をクリックします。<br>**i** ［**コンフィグレーション**］>［**ユーザーインターフェイス コンフィグレーション**］をクリックします。<br>**j** すべてのチェックボックスをオンにして、すべてのオプションが使用できるようにします。<br>**k** ［**OK**］ボタンをクリックします。 | • 一般ワークフローのデフォルトのレイアウトが自動的に読み込まれます。このデフォルトレイアウトに戻すには、［**表示**］>［**ウィンドウレイアウト**］>［**デフォルトレイアウトの復元**］をクリックします。このコマンドは常に、一般ワークフローに使用されるレイアウトに復元します。<br>• メソッドを読み込むには、以下の操作を行います。<br>• ［**メソッド**］>［**開く**］をクリックします。<br>• メソッドを選択します。<br>• ［**開く**］をクリックします。<br>• 先の実習で述べたように、メソッドに変更を加えると、変更された項目の横と［メソッドエクスプローラ］の変更されたセクションの横に青色三角形が表示されます。 |
| **2** メソッドを設定し、TIC クロマトグラムを抽出します。<br>• MS データに TIC クロマトグラムを定義します。<br>• MS のみのデータファイルであるため、サイクル合計をオフにします。 | **a** ［メソッドエクスプローラ］ウィンドウで、［**クロマトグラム**］>［**クロマトグラムの定義**］を選択します。<br>**b** **BPC** クロマトグラムを削除します。<br>**c** ［**タイプ**］リストで［**TIC**］を選択します。<br>**d** ［MS レベル］が［**MS**］であることを確認します。<br>**e** ［**サイクル合計を実行**］チェックボックスをオフにします。<br>**f** ［**追加**］をクリックします。 | |
| **3** メソッドを編集し、データを積分します。<br>• 4 つの最大ピークのみ積分します。 | **a** ［メソッドエクスプローラ］ウィンドウで、［**クロマトグラム**］>［**積分 (MS)**］をクリックします。<br>**b** ［**ピークフィルタ**］タブをクリックします。<br>**c** ［ピークの最大数］セクションで、［**ピーク数を高さベースで制限する**］チェックボックスをオンにします。<br>**d** 4 を入力します。 | • ［クロマトグラム］>［積分 (MS)］セクションの［ピークフィルタ］タブの値を更新すると、［メソッドエクスプローラ］の他のセクションの値も更新されます。青色三角形が表示されたセクションが、その他の更新されたセクションです。 |

タスク 1. 定性分析メソッドの設定と実行

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
| --- | --- | --- |

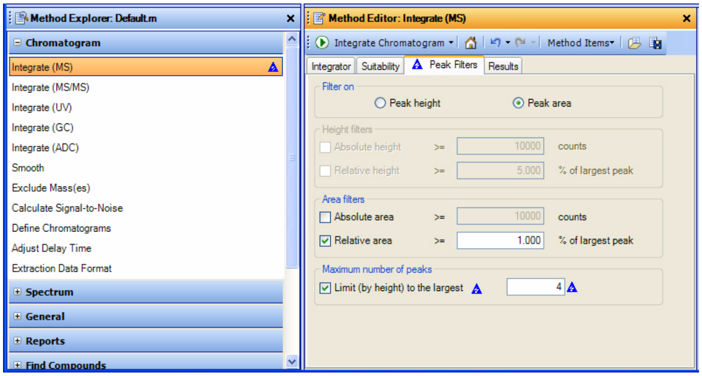


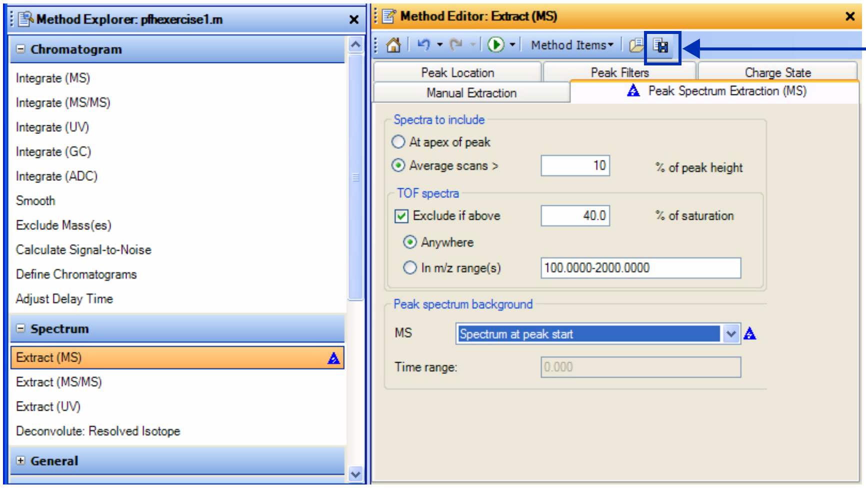

**図 91**　［クロマトグラム］ > ［積分 (MS)］ > ［ピークフィルタ］タブ

［メソッドの保存］アイコンをクリックすると、現在のメソッドが保存されます。

| | | |
| --- | --- | --- |
| **4** 積分を実行して積分された 4 つのピークのみが表示されることを確認します。 | • ［**クロマトグラムの積分**］アイコン をクリックし、データファイルを積分します。 | |
| **5** メソッドを*iii*exercise1に保存します。ここで、「*iii*」はユーザーのイニシャルです。 | **a** トップメニューから［**メソッド**］>［**名前を付けて保存**］をクリックします。<br>**b** **iiiexercise1** を入力します。<br>**c** ［**保存**］ボタンをクリックします。 | • メソッドを保存すると、メソッドで変更された値を示す青色三角形のすべてが消えることを確認します。 |
| **6** ピーク開始時のスペクトルを使用するようピークスペクトルバックグラウンドを変更します。 | **a** ［メソッドエクスプローラ］ウィンドウで、［**スペクトル**］>［**抽出 (MS)**］をクリックします。<br>**b** ［**ピークスペクトル抽出 (MS)**］をクリックします。<br>**c** ピークスペクトルバックグラウンドで［**ピーク開始点のスペクトル**］を選択します。 | • メソッド保存後に追加の変更を行うと、青色三角形が表示されます。 |

タスク 1. 定性分析メソッドの設定と実行

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|



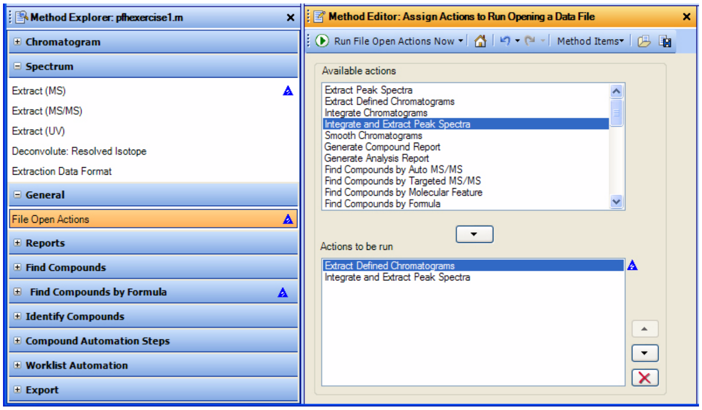

［メソッドの保存］アイコンをクリックすると、現在のメソッドが保存されます。

**図 92** ［スペクトル］>［抽出 (MS)］>［ピークスペクトル抽出 (MS)］タブ

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|
| **7** MS スペクトルの抽出を実行してバックグラウンドスペクトルが減算されることを確認します。 | • **［MS スペクトルの抽出］**アイコン をクリックし、データファイルの選択されたピークで処理を実行します。 | |
| **8** メソッドを保存します。 | • 以下の 3 つの方法のいずれかで、メソッドを保存します。<br> •［メソッドエディタ］の**［メソッドの保存］**アイコン をクリックします。<br>•［メソッドエディタ］を右クリックし**［メソッドの保存］**をクリックします。<br>• トップメニューから**［メソッド］>［保存］**をクリックします。 | •［メソッドの保存］アイコンは 133 ページの図 92 に示されています。 |

タスク 1. 定性分析メソッドの設定と実行

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|
| **9** データファイルを開くときに、ここまでに変更したパラメータ処理を自動的に実行するメソッドを設定します。<br>• このデータファイルやその他のデータファイルを開く際に、実行する処理のリストを作成します。<br><br>ヒント:［メソッドエクスプローラ］の［一般］を使用します。 | **a**［メソッドエクスプローラ］ウィンドウで、**［一般］>［ファイルを開くときにする処理］**を選択します。<br>**b** **［使用可能な処理］**リストから**［ピークスペクトルの積分と抽出］**を選択します。<br>**c** **追加ボタン** をクリックし、選択した処理を**［実行する処理］**リストに移動します。<br>選択した処理をダブルクリックしてリスト間を移動させることもできます。 | |
| **10**［ファイルを開くときにする処理］をテストします。 | • **［ファイルを開くときにする処理を今すぐ実行］**アイコン をクリックし、データファイルの処理を実行します。 | • クロマトグラムとスペクトルは上書きされません。新しいクロマトグラムとスペクトルが追加されます。 |



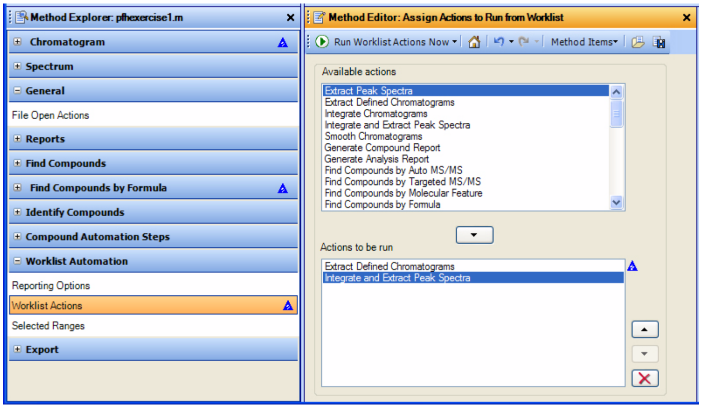

**［実行する処理］リストには、2 つの処理があります。最初の処理では定義済みのクロマトグラムを抽出します。その後、そのクロマトグラムが積分され、ピークが抽出されます。**

**図 93** ［メソッドエディタ］の［一般］>［ファイルを開くときにする処理］セクション

| | | |
|---|---|---|
| **11** メソッドを保存し、結果を保存せずにデータファイルを閉じます。 | **a**［メソッドエディタ］の**［メソッドの保存］**アイコンをクリックします。<br>**b** **［ファイル］>［データファイルを閉じる］**をクリックし、結果の保存を求められたら**［いいえ］**をクリックします。 | |

タスク 1. 定性分析メソッドの設定と実行

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
| --- | --- | --- |
| **12** ワークリストでメソッドを実行するときに、処理を自動的に実行するメソッドを設定します。<br>• このデータファイルやその他のデータファイルを開く際に、実行する処理のリストを作成します。<br><br>ヒント：［メソッドエクスプローラ］の［ワークリスト自動化］を使用します。 | **a**［メソッドエクスプローラ］ウィンドウで、**［ワークリスト自動化］>［ワークリスト処理］**を選択します。<br>**b** **実行する処理リストの［解析レポートの作成］**を削除します。 | |
| **13**［ワークリスト処理］をテストします。 | • **［ワークリスト処理を今すぐ実行］**アイコン をクリックし、データファイルの処理を実行します。 | • クロマトグラムとスペクトルは上書きされません。新しいクロマトグラムとスペクトルが追加されます。 |




メソッドには 2 つの異なる処理リストが含まれます。1 つ目の処理リスト（ファイルを開くときにする処理）は、データファイルを開くときに実行できます。2 つ目の処理リスト（ワークリスト処理）は、ワークリストの一部としてメソッドを実行するときに実行されます。

**図 94**　［メソッドエディタ］の［ワークリスト自動化］>［ワークリスト処理］セクション

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
| --- | --- | --- |
| **14** メソッドを保存し、結果を保存せずにデータファイルを閉じます。 | **a**［メソッドエディタ］の**［メソッドの保存］**アイコンをクリックします。<br>**b** **［ファイル］>［データファイルを閉じる］**をクリックし、結果の保存を求められたら**［いいえ］**をクリックします。 | |

# タスク 2. クロマトグラムピーク調査ワークフローの自動解析メソッドの設定と実行

このタスクでは、特定の順序で実行する解析処理のリストを含む定性分析メソッドを設定します。この設定では、クロマトグラムの抽出と積分、スペクトルの抽出、ピークスペクトルのデータベース検索、スペクトルの化学式の作成、解析レポートの印刷を行います。

このメソッドはクロマトグラムピーク調査ワークフローに切り替えて設定します。データファイルを開いたときに、メソッドでこの自動解析を実行するようにも設定します。

［クロマトグラムピーク調査］ワークフローで使用できるのは、LC/MS データファイルのみです。

タスク 2. 自動解析メソッドの設定と実行

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|
| **1** **sulfas_PosMS.d** を再び開きます。<br>• ファイルを開く際に、メソッドによってデータファイルの処理が実行されないことを確認します。<br>• メソッドが *iii*exercise1.m であることを確認します。 | **a** **［コンフィグレーション］>［ワークフローのコンフィグレーション］>［クロマトグラムピーク調査］**コマンドをクリックします。<br>**b** **［ワークフローのデフォルトメソッドを読み込む］**ボタンと**［ワークフローのデフォルトレイアウトを読み込む］**ボタンをクリックします。<br>**c** **［OK］**をクリックします。<br>**d** **［コンフィグレーション］>［ユーザーインターフェイス コンフィグレーション］**をクリックします。<br>**e** すべてのチェックボックスをオンにして、すべてのオプションが使用できるようにします。<br>**f** **［OK］**ボタンをクリックします。<br>**g** **［ファイル］>［データファイルを開く］**をクリックします。<br>**h** ［データファイルを開く］ダイアログボックスで **sulfas_PosMS.d** を選択します。<br>**i** **［選択したメソッドでファイルを開くときにする処理を実行］**チェックボックスをオフにします。<br>**j** **［開く］**をクリックします。<br>**k** **［メソッド］>［開く］**をクリックして iiiexercise1.m メソッドを選択し**［開く］**をクリックします。 | • **［結果データの読み込み］**チェックボックスがオフか灰色表示のどちらかになっていることを確認します。<br>• 異なるワークフローに切り替えると、新しいメソッドと新しいウィンドウレイアウトが読み込まれ、新しいセクションが［メソッドエクスプローラ］に追加されます。<br>• メソッドへの変更の保存を求められたら**［いいえ］**をクリックします。 |

タスク 2. 自動解析メソッドの設定と実行

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|
| **2** [クロマトグラムピーク調査] アルゴリズムのセクションを参照してください。 | • [メソッドエクスプローラ] ウィンドウで、**[クロマトグラムピーク調査ワークフロー]** をクリックします。 | • このワークフローにはセクションが 11 個あります。ほとんどのセクションは、一般ワークフローのセクションと同じです。 |
| **3** 新しい結果で前の結果を上書きすることを確認します。 | **a** [メソッドエクスプローラ] ウィンドウで、**[前の結果]** を選択します。<br>**b** **[前の結果をすべて削除]** チェックボックスをオンにします。 | • [メソッドエクスプローラ] の他のセクションに、青色三角形が表示されていることを確認してください。これは、他の場所でも同じパラメータ値が変更されたことを示します。 |
| **4** TIC を抽出し、4 つの大きなピークを積分します。 | **a** **[クロマトグラムの抽出]** を選択します。<br>**b** **[クロマトグラム]** タブをクリックします。<br>**c** マススペクトルの検索に使用されるクロマトグラムに **TIC** が選択されていることを確認します。<br>**d** [抽出する追加のクロマトグラム] で **[シグナル A]** をオンにします。<br>**e** [メソッドエクスプローラ] の **[クロマトグラムの積分]** セクションを選択します。<br>**f** **[ピーク (MS)]** タブをクリックし、**[ピーク数を高さベースで制限する]** をオンにして 4 を入力します。 | • [クロマトグラムの抽出] セクションは他の場所には存在しないセクションです。そのためこの情報は [メソッドエディタ] の他の箇所からは入力できません。 |
| **5** MS スペクトルを抽出し、ピーク前後のスペクトルの平均ピークスペクトルバックグラウンドを減算するように設定します。 | **a** **[マススペクトルの抽出]** を選択します。<br>**b** **[ピークスペクトル]** タブをクリックします。<br>**c** **[ピークスペクトルバックグラウンド]** で **[ピーク開始点と終了点のスペクトルの平均]** を選択します。 | |
| **6** すべてのスペクトルピークに対してデータベースを検索し、化学式を作成するように設定します。<br>• [分子式作成] および [データベース検索] のパラメータ値は変更しないでください。 | **a** [メソッドエクスプローラ] で **[スペクトルピーク同定]** を選択します。<br>**b** **[ピークをデータベースで検索]** チェックボックスをオンにします。<br>**c** **[各ピークの化学式を作成]** チェックボックスをオンにします。<br>**d** **[すべてのピーク]** ボタンをクリックします。 | • [スペクトルピーク同定] セクションは他の場所には存在しないセクションです。そのためこの情報は [メソッドエディタ] の他の箇所からは入力できません。 |

タスク 2. 自動解析メソッドの設定と実行

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
| --- | --- | --- |
| 7 この時点までの自動解析プロセスをテストします。 | • ［スペクトルピーク同定］セクションから［**クロマトグラムピーク調査の実行**］アイコン をクリックします。 | • ［分子式作成］セクションから アイコンをクリックする場合、矢印をクリックし、適用可能な処理のリストから［**クロマトグラムピーク調査の実行**］を選択します。このセクションで実行されるデフォルトの処理は［**スペクトルピークから化学式を作成**］です。その他のセクションでも異なるデフォルト処理が設定されている場合があります。 |
| 8 ［スペクトル同定結果］ウィンドウ開き、以下を表示します。<br>• このリストは、図 95 のように［クロマトグラム結果］と同じウィンドウにタブ表示されます。<br>• 自動化が正しく実行された場合は、メソッドを保存します。 | **a** ［**表示**］>［**スペクトル同定結果**］をクリックします。<br>**b** 各 MS スキャンの結果をレビューして［クロマトグラムピーク調査］アルゴリズムのすべての処理が実行されたことを確認します。 | • メイン画面内でウィンドウを移動させる方法については、タスク 4. ウィンドウレイアウトの変更 22ページを参照してください。<br>• メインツールバーのアイコンを使用してこれらのウィンドウを表示させることもできます。 |

## タスク 2. 自動解析メソッドの設定と実行

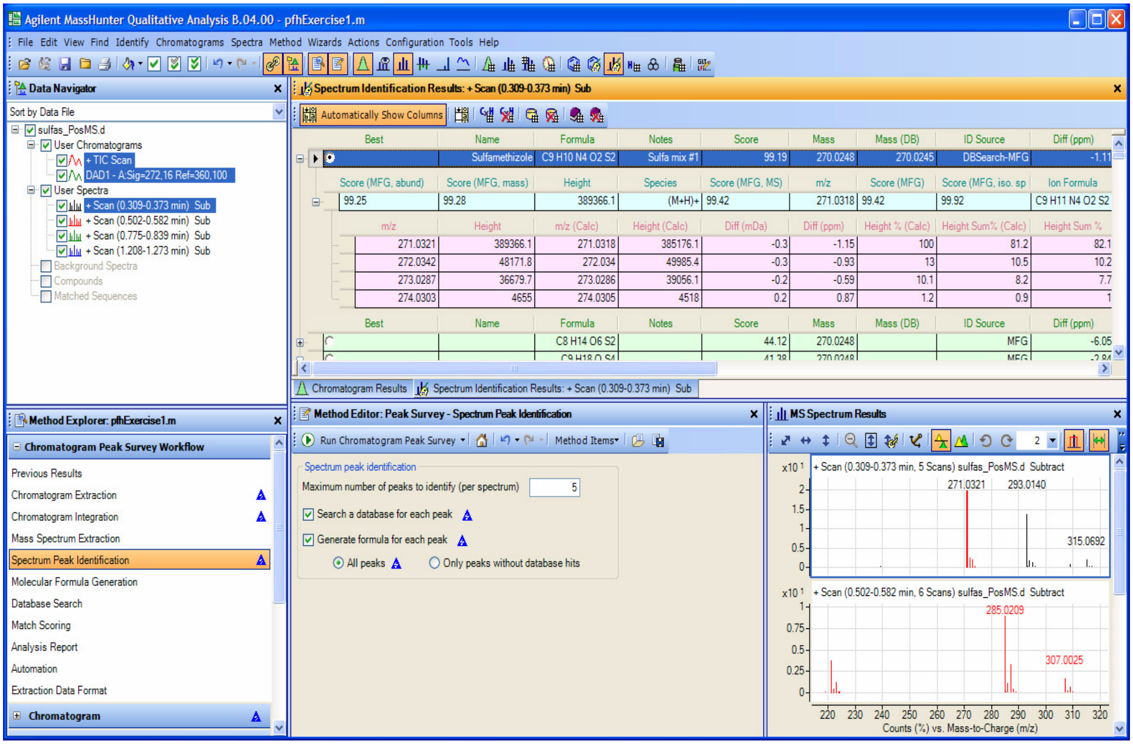



図 95 自動解析ステップを実行してタブ表示された結果

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
| --- | --- | --- |
| **9** メソッドを*iii*exercise2に保存します。ここで、「*iii*」はユーザーのイニシャルです。 | **a** メニューから［**メソッド**］>［**名前を付けて保存**］をクリックします。<br>**b** **iiiexercise2** を入力します。<br>**c** ［**保存**］をクリックします。 | • メソッドを保存すると、メソッドで変更された値を示す青色三角形のすべてが消えることを確認します。 |
| **10** 解析レポートを設定し、この実習で印刷するセクションを指定します。<br>• メソッドを保存します。 | **a** ［メソッドエクスプローラ］で［**解析レポート**］を選択します。<br>**b** ［**コンテンツ**］タブをクリックします。<br>**c** 必要な変更を行います。<br>**d** ［**解析レポートの印刷**］アイコンをクリックします。<br>**e** 必要に応じて［メソッドエディタ］の［**メソッドの保存**］アイコンをクリックします。 | • 実行する処理を選択する際に、レポートを印刷するかどうかを選択します。 |

タスク 2. 自動解析メソッドの設定と実行

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|
| **11** データファイルを開くときに自動解析を実行するメソッドを設定します。<br>• メソッドを保存します。 | **a** ［メソッドエクスプローラ］で［**自動化**］を選択します。<br>**b** ［**ファイルを開くときにする処理**］をクリックします。<br>**c** ［**実行する処理**］リストの各項目を選択し［**削除**］アイコン をクリックします。<br>**d** ［**使用可能な処理**］リストで［**クロマトグラムピーク調査（解析レポートなし）**］を選択し［**追加**］ボタン をクリックします。<br>**e** ［メソッドエディタ］の［**メソッドの保存**］アイコンをクリックします。 | • 必要に応じて、これらの処理をテストします。 |
| **12** ［メソッドエディタ］、［メソッドエクスプローラ］、［データナビゲータ］ウィンドウを閉じます。<br>• 図 96のレイアウトと同じになるように、ウィンドウを移動します。<br>• 結果を保存せずにデータファイルを閉じます。 | **a** ［メソッドエディタ］、［メソッドエクスプローラ］、［データナビゲータ］の［**閉じる**］ボタンをクリックします。<br>**b** ウィンドウが図 96 と同じになるように、ウィンドウを移動します。<br>**c** ［**ファイル**］>［**データファイルを閉じる**］をクリックします。<br>**d** 結果の保存を求められたら、［**いいえ**］をクリックします。 | • 新しいデータファイルを開いたときに表示されるウィンドウレイアウトは、最後に使用したウィンドウレイアウトです。 |
| **13 sulfas_PosMS.d** データファイルを再び開き、自動解析を実行します。<br>• 図 96と同様の結果になることを確認します。 | **a** ［**ファイル**］>［**データファイルを開く**］をクリックします。<br>**b** sulfas_PosMS.d を選択します。<br>**c** ［**選択したメソッドでファイルを開くときにする処理を実行**］チェックボックスをオンにします。<br>**d** ［**開く**］をクリックします。 | |

## タスク 2. 自動解析メソッドの設定と実行

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
| --- | --- | --- |

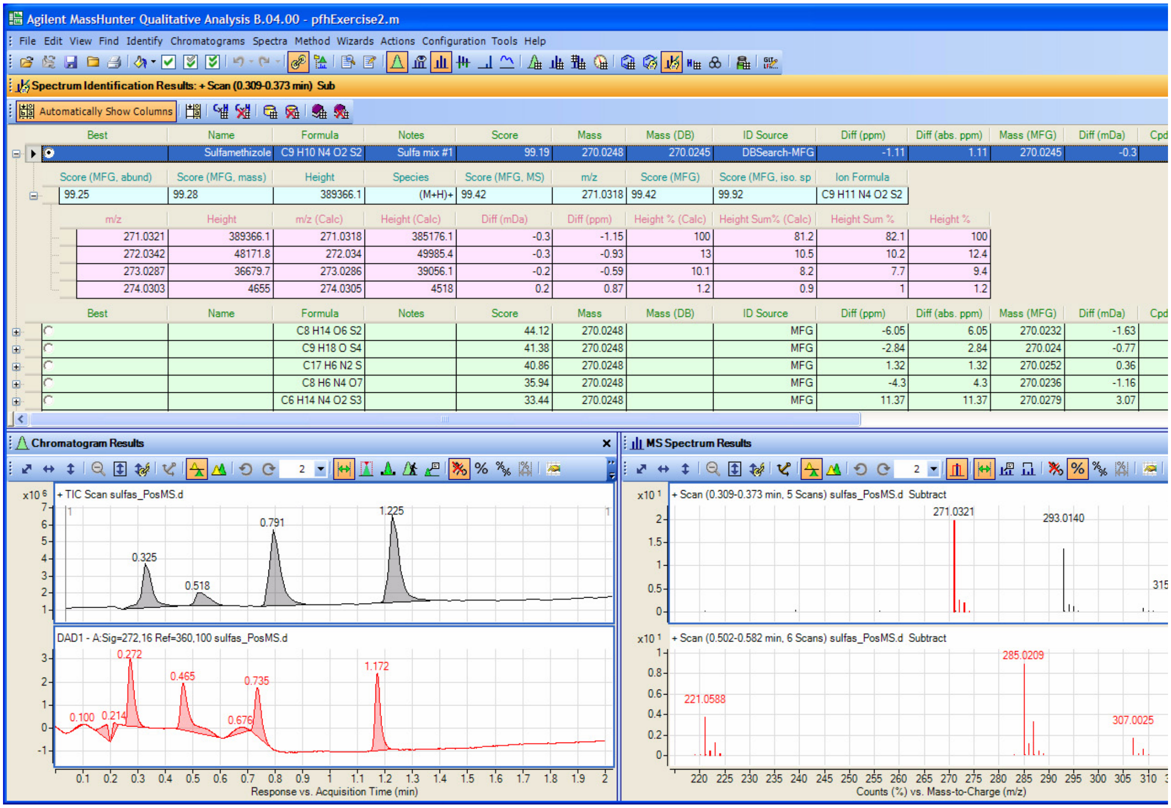



**図 96**　sulfas_PosMS.d データファイルを開くときにクロマトグラムピーク調査処理をした結果

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
| --- | --- | --- |
| **14** 結果を保存せずに、データファイルを閉じます。 | **a** ［ファイル］>［データファイルを閉じる］をクリックします。<br>**b** 結果の保存を求められたら、［いいえ］をクリックします。 | |

# タスク 3. MS ターゲット化合物のスクリーニングワークフローで化合物同定を自動化するメソッドの設定と実行

このタスクでは、化合物を検出し同定する処理リストを含む定性分析メソッドを設定します。この設定では、選択したアルゴリズムに基づき化合物を検出、化合物をデータベースで検索、特定化合物の化学式を作成、化合物レポートの作成を行います。

このメソッドは MS ターゲット化合物のスクリーニングワークフローに切り替えて設定します。このメソッドは［化合物の自動解析ステップ］セクションを使用して設定することもできます。データファイルを開いたときにメソッドで化合物の自動化を実行するようにも設定します。

MS ターゲット化合物のスクリーニングワークフローで使用できるのは、LC/MS データファイルのみです。

タスク 3. 化合物同定を自動化するメソッドの設定と実行

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
| --- | --- | --- |
| 1 **sulfas_PosMS.d** を再び開きます。<br>• ファイルを開く際に、メソッドによってデータファイルの処理が実行されないことを確認します。<br>• メソッドが *iii*exercise2.m であることを確認します。<br>• MS ターゲット化合物のスクリーニングワークフローで作業を開始します。 | **a** ［**コンフィグレーション**］>［**ワークフローのコンフィグレーション**］>［**MS ターゲット化合物のスクリーニング**］をクリックします。<br>**b** ［**ワークフローのデフォルトメソッドを読み込む**］ボタンと［**ワークフローのデフォルトレイアウトを読み込む**］ボタンをクリックします。<br>**c** ［**OK**］ボタンをクリックします。<br>**d** ［**コンフィグレーション**］>［**ユーザーインターフェイス コンフィグレーション**］をクリックします。<br>**e** すべてのチェックボックスをオンにして、すべてのオプションが使用できるようにします。<br>**f** ［**OK**］ボタンをクリックします。<br>**g** ［**ファイル**］>［**データファイルを開く**］をクリックします。<br>**h** ［データファイルを開く］ダイアログボックスで **sulfas_PosMS.d** を選択します。<br>**i** ［**選択したメソッドでファイルを開くときにする処理を実行**］チェックボックスをオフにします。<br>**j** ［**開く**］をクリックします。<br>**k** ［**メソッド**］>［**開く**］をクリックします。*iii*exercise2.m メソッドを選択します。<br>**l** ［**開く**］をクリックします。<br>**m** メソッドの変更を保存するかどうかのダイアログでは［**いいえ**］をクリックします。 | • ［**結果データの読み込み**］チェックボックスがオフか灰色表示のどちらかになっていることを確認します。<br>• MS ターゲット化合物のスクリーニングワークフローに切り替えると、Screening-Default.m メソッドが読み込まれます。<br>• MassHunter フォルダが D: ドライブのデフォルト位置にない場合は、このワークフローに切り替えるとメソッドでエラーが発生します。データベースのフォルダは、適切な位置に変更することができます。 |

タスク 3. 化合物同定を自動化するメソッドの設定と実行

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|
| **2** 化合物の検出と同定に関する自動化ステップを開きます。<br>• [メソッドエディタ] ウィンドウを任意の場所にタブ付けします。 | **a** [メソッドエクスプローラ] ウィンドウで、**[MS ターゲット化合物スクリーニングワークフロー] > [自動化]** をクリックします。<br>**b** (オプション) [メソッドエディタ] ウィンドウを [データナビゲータ] と同じウィンドウにタブ付けします。<br>**c** **[化合物リスト]** ウィンドウを閉じます。 | • このワークフローでは [メソッドエディタ] はフローティングウィンドウです。フローティングウィンドウのままにしておくことも [データナビゲータ] ウィンドウなどの別のウィンドウにタブ表示することもできます。 |
| **3** すべての化合物に対してデータベースを検索し、化学式を作成するように選択します。<br>• Molecular Feature で化合物を検出していることを確認します。 | **a** **[解析オプション]** タブをクリックします。<br>**b** **[Molecular Feature による検出]** を選択します。<br>**c** **[化合物をデータベースで検索]** チェックボックスをオンにします。<br>**d** **[各化合物の化学式を作成]** チェックボックスをオンにします。<br>**e** **[すべての化合物]** をクリックします。<br>**f** **[同定された化合物のみを表示]** チェックボックスをオンにします。 | • 化合物は [データベースの検索]、[化学式の作成] 、[ライブラリの検索] のアルゴリズム、または化合物が検出されている場合は [化学式による検出] アルゴリズムを使用して同定することができます。MassHunter BioConfirm ソフトウェアがインストールされている場合は、化合物は [シーケンスの照らし合わせ] アルゴリズムでも同定できます。 |
| **4** 新しい結果で前の結果を上書きすることを確認します。 | **a** **[結果]** タブをクリックします。<br>**b** **[前の結果をすべて削除]** チェックボックスをオンにします。 | |
| **5** この時点までの自動化プロセスをテストします。 | • [MS ターゲット化合物スクリーニングワークフロー] > **[自動化]** **セクションのいずれかから** [化合物の自動解析ステップの実行] アイコンをクリックします。 | |
| **6** 以下のウィンドウを開いて表示します。<br>• 化合物リスト<br>• 化合物同定結果<br>• ウィンドウが図 97のように表示されていることを確認します。<br>• 各化合物 (化合物 1 と 2 を除く) の各リストをレビューします。 | **a** (必要に応じて) **[表示] > [化合物リスト]** をクリックします。<br>**b** (必要に応じて) **[表示] > [化合物同定結果]** をクリックします。<br>**c** [データナビゲータ] で化合物 1 と化合物 2 のチェックボックスをオフにします。[化合物リスト] ウィンドウの **[表示 / 非表示]** 列でも、化合物 1 と化合物 2 のチェックボックスをオフにすることができます。<br>**d** 同定済み化合物の各リストをレビューして、[化合物の自動解析ステップ] のすべての処理が実行されたことを確認します。 | • メイン画面内でウィンドウを移動させる方法については、実習 1 のタスク 4 を参照します。<br>• [化合物同定結果] ウィンドウは [クロマトグラム結果] と同じウィンドウにタブ表示されます (図 97)。 |

タスク 3. 化合物同定を自動化するメソッドの設定と実行

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
| --- | --- | --- |
| **7** メソッドを*iii*exercise3に保存します。ここで、「*iii*」はユーザーのイニシャルです。 | **a** トップメニューから［メソッド］>［名前を付けて保存］をクリックします。<br>**b** **iiiexercise3** を入力します。<br>**c** ［保存］をクリックします。 | • メソッドを保存すると、メソッドで変更された値を示す青色三角形のすべてが消えることを確認します。 |

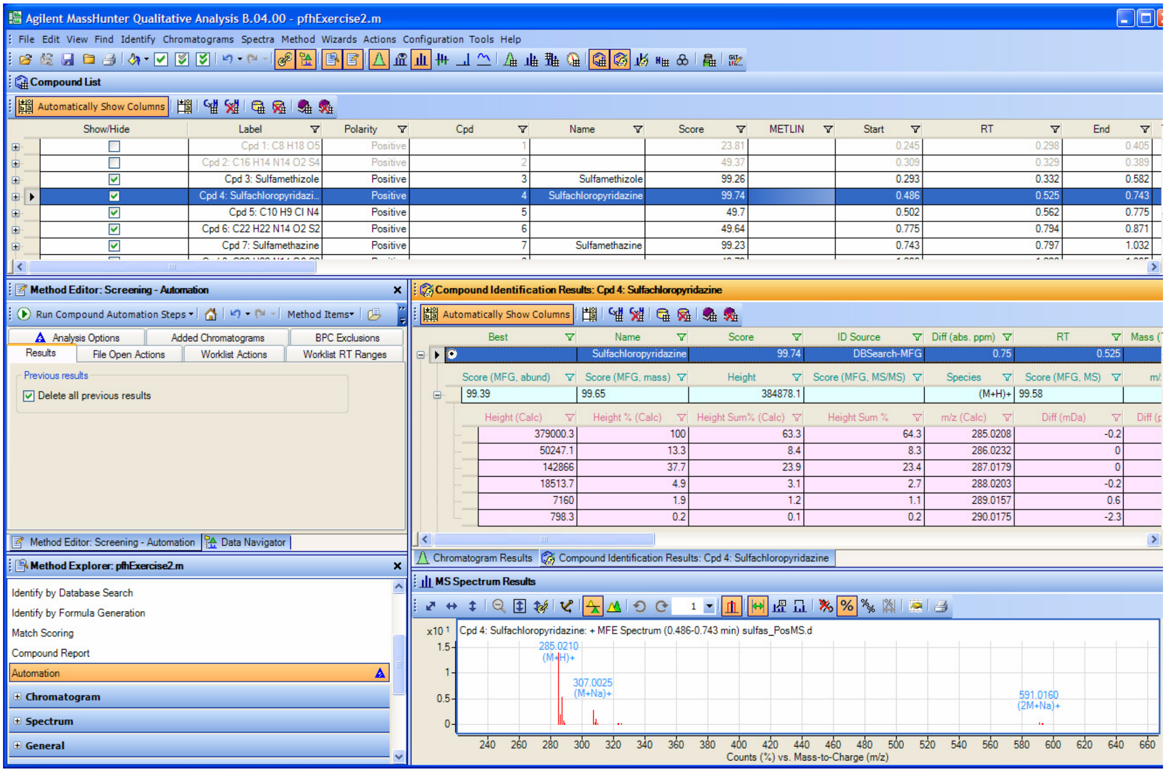



**図 97**　化合物の自動解析ステップを実行してタブ表示された結果

| | | |
| --- | --- | --- |
| **8** この実習用の化合物レポートを設定します。<br>• 必要に応じて、メソッドを保存します。 | **a** ［化合物レポート］を選択します。<br>**b** 必要な変更を行います。<br>**c** 必要に応じて［メソッドエディタ］の［メソッドの保存］アイコンをクリックします。 | |

タスク 3. 化合物同定を自動化するメソッドの設定と実行

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|
| **9** データファイルが開くと化合物同定を自動実行するメソッドを設定します。<br>• メソッドを保存します。 | **a** **[MSターゲット化合物スクリーニングワークフロー]>[自動化]>[ファイルを開くときにする処理]** を選択します。<br>**b** **[実行する処理]** リストの各処理を選択し **[削除]** アイコン をクリックします。<br>**c** **[使用可能なアクション]** リストで **[化合物の自動解析（レポートなし)]** を選択し **[追加]** ボタン をクリックします。<br>**d** ［メソッドエディタ］の **[メソッドの保存]** アイコンをクリックします。 | • 必要に応じて、これらの処理をテストします。 |
| **10** [メソッドエディタ]、[メソッドエクスプローラ]、[データナビゲータ] を閉じます。<br>• 図 98のレイアウトと同じになるように、ウィンドウを移動します。<br>• 結果を保存せずにデータファイルを閉じます。 | **a** ［メソッドエディタ］、［メソッドエクスプローラ］、［データナビゲータ］の **[閉じる]** ボタンをクリックします。<br>**b** ウィンドウが図 98 と同じになるように、ウィンドウを移動します。<br>**c** **[ファイル] > [データファイルを閉じる]** をクリックします。<br>**d** 結果の保存を求められたら、**[いいえ]** をクリックします。 | • ウィンドウを移動させる方法については、実習 1 のタスク 4 を参照します。 |
| **11** **sulfas_PosMS.d** データファイルを再び開き、化合物同定を自動実行します。<br>• 図 98と同様の結果になることを確認します。<br>• ［化合物リスト］の化合物 1 と化合物 2 を非表示にします。 | **a** **[ファイル] > [データファイルを開く]** をクリックします。<br>**b** **[選択したメソッドでファイルを開くときにする処理を実行]** チェックボックスをオンにします。<br>**c** **[開く]** をクリックします。<br>**d** ［化合物リスト］の化合物 1 と化合物 2 の **[表示 / 非表示]** 列のチェックボックスをオフにします。 | • 化合物 1、2、5、6、および 8 は［データベース検索］アルゴリズムで検出されていませんが［化学式の作成］アルゴリズムにより化学式が作成されています。 |

タスク 3. 化合物同定を自動化するメソッドの設定と実行

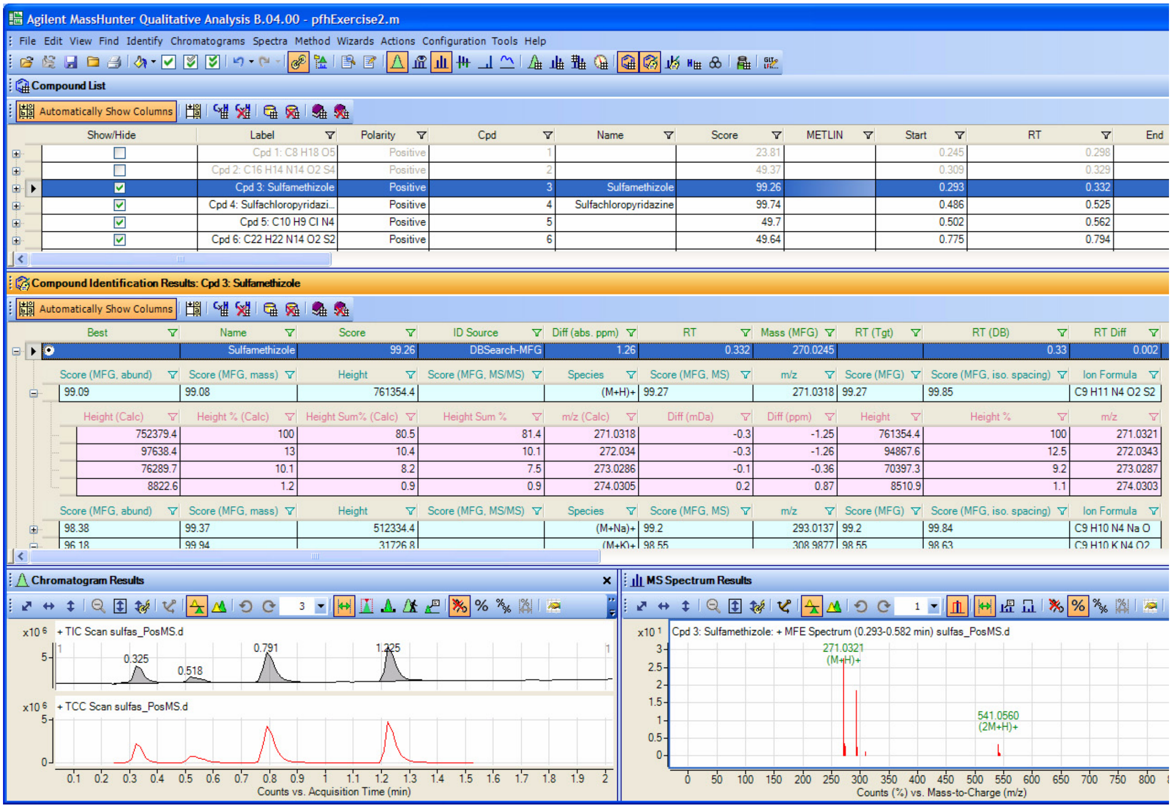



図 98 sulfas_PosMS.d データファイルを開くときに化合物同定を自動実行した結果

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
| --- | --- | --- |
| 12 結果を保存せずに、データファイルを閉じます。 | a ［ファイル］>［データファイルを閉じる］をクリックします。<br>b 結果の保存を求められたら、［いいえ］をクリックします。 | |

# タスク 4. ワークリストで実行する定性メソッドの設定

このタスクでは、ワークリストを実行する際に行う処理リストを含む定性分析メソッドを設定します。測定パラメータと定性分析パラメータの両方を含むメソッドの保存方法を学習しますが、このタスクでは実際には行いません。

タスク 4. ワークリストで実行する定性メソッドの設定

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
| --- | --- | --- |
| **1** sulfas_PosMS.d データファイルを読み込みます。<br>• タスク 2 で保存したメソッドを開きます。<br>• ファイルを開くときにする処理が実行されないことを確認します。<br>• デフォルトのウィンドウレイアウトを復元します。 | **a** デフォルトワークフローに戻すには **[コンフィグレーション] > [ワークフローのコンフィグレーション] > [一般]** をクリックします。<br>**b** **[OK]** をクリックして続行します。<br>**c** **[ファイル] > [データファイルを開く]** をクリックします。<br>**d** [データファイルを開く] ダイアログボックスで **sulfas_PosMS.d** を選択します。<br>**e** **[選択したメソッドでファイルを開くときにする処理を実行]** チェックボックスをオフにします。<br>**f** **[開く]** をクリックします。<br>**g** ***iii*Exercise2.m** メソッドを読み込みます。 | • このタスクでは、定性分析パラメータのみを含むメソッドを作成します。<br>• このメソッドからワークリストメソッドを作成するには、測定プログラムを使用して、このメソッドに測定パラメータを追加する必要があります。<br>• [データファイルを開く] ダイアログボックスの **[ワークリストメソッドの読み込み]**（使用可能と仮定する）を選択すると、データファイルを作成した測定メソッドのワークリストの定性分析部分を用いて、データファイルが開かれます。<br>• 既存の測定メソッドに定性分析パラメータを保存することで、測定パラメータと定性分析パラメータの両方を含むワークリストメソッドを作成できます。<br>• すべての解析を自動ステップにしたメソッドを設定することもできます。設定後に、これらの自動解析処理を削除することも、再度追加することもできます。<br>• [化合物の自動解析] でも同じ操作が可能です。 |

タスク 4. ワークリストで実行する定性メソッドの設定

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|
| **2** ワークリストの各解析完了時に自動的に実行されるメソッドを設定します。<br>以下のタスクを実行するようにメソッドを設定します。<br>• 定義済みクロマトグラムの抽出<br>• ピークスペクトルの積分と抽出<br>• 解析レポートの作成<br><br>ヒント：［メソッドエクスプローラ］の［ワークリスト自動化］を使用します。 | **a** ［メソッドエクスプローラ］で［**ワークリスト自動化**］>［**ワークリスト処理**］を選択して［**実行する処理をワークリストから割り当て**］セクションを表示します。<br>**b** 以下の処理が、この順番で［**実行する処理**］リストにあることを確認します。<br>• 定義済みクロマトグラムの抽出<br>• ピークスペクトルの積分と抽出<br>• 解析レポートの作成<br>**c** 必要に応じて［**使用可能な処理**］リストからそれぞれの処理を選択し［**追加**］ボタン をクリックして選択した処理を［**実行する処理**］リストに移動します。<br>選択した処理をダブルクリックしてリスト間を移動させることもできます。<br>**d** 不要な処理がある場合は［**実行する処理**］リストで該当する処理を選択し［**削除**］アイコン をクリックします。 | |

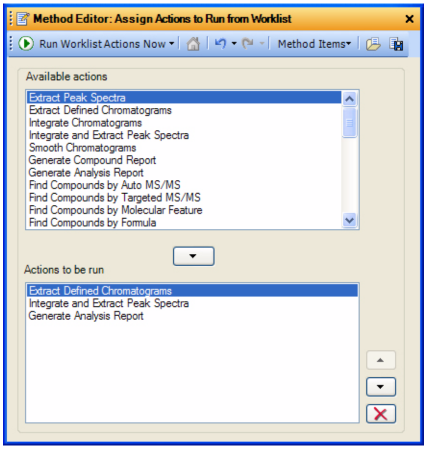



**図 99**　［メソッドエディタ］の［ワークリスト処理］セクション

タスク 4. ワークリストで実行する定性メソッドの設定

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|
| **3** メソッドを *iii***exercise 2worklist.m** に保存します。ここで、「*iii*」はユーザーのイニシャルです。<br>• 結果を保存せずに、プログラムを閉じます。 | **a** メソッドを保存するには［**メソッド**］>［**名前を付けて保存**］をクリックします。<br>**b** ***iii*exercise2worklist.m** と入力します。<br>**c** ［**保存**］をクリックします。<br>**d** ［**ファイル**］>［**終了**］をクリックします。<br>**e** 結果の保存を求められたら［**いいえ**］をクリックします。 | • 測定プログラムを使用して、メソッドに測定パラメータを追加した後、同じ名前または名前を付けてメソッドを保存することができます。<br>• ワークリストから実行するときに、（測定パラメータを追加している場合）このメソッドはデータを連続して自動的に測定、解析します。［ワークリスト処理］セクションの［**実行する処理**］リストにある処理が自動的に実行されます。 |

# 実習 4
# 定性分析のウィザード

タスク 1. ［クロマトグラムピークの同定］ウィザードの実行 152
タスク 2. ［ターゲットの検出 : MFE + データベース検索］ウィザードの実行 159

定性分析プログラムには複数のウィザードがあります。これらのウィザードは、特定タスクの実行に必要な一連のステップをガイドします。

- ［クロマトグラムピークの同定］ウィザード - このウィザードは、［クロマトグラムピーク調査（解析レポートなし）］処理の実行前に変更するメソッドエディタのさまざまなセクションとタブをガイドします。
- ［ターゲットの検出 : **MFE** + データベース検索］ウィザード - このウィザードは、［**Molecular Feature** による検出］アルゴリズムおよび［データベース検索］アルゴリズムの実行前に変更するメソッドエディタのさまざまなセクションとタブをガイドします。

表示されるメソッドエディタセクションは、［メソッドエディタ］ウィンドウでも更新することができます。

BioConfirm をインストールすると、さらに複数のウィザードが追加されます。追加されるその他のウィザードは、『**BioConfirm Familiarization Guide**』で説明されています。

実習方法を示す表は、以下の 3 列に分けて表示されています。

- ステップ - 操作概要です。各自でプログラムを実行します。
- 詳細説明 - ステップの実行に必要な手順を示しています。
- コメント - 実習の各ステップに関するヒントや追加情報を記しています。

## タスク 1.［クロマトグラムピークの同定］ウィザードの実行

このウィザードを実行すると、［クロマトグラムピーク調査（解析レポートなし）］処理に影響を与えるメソッドエディタセクションとその他のページのすべてが表示されます。さらに［完了］ボタンをクリックすると、メソッドの変更が保存され、［クロマトグラムピーク調査（解析レポートなし）］処理が実行されます。

タスク 1.［クロマトグラムピークの同定］ウィザードの実行

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
| --- | --- | --- |
| 1 **sulfas_PosMS.d** データファイルを開きます。<br>• データファイルが開かれたときに、プログラムによる自動ファイル処理が実行されないことを確認します。<br>• メソッドが Default.m であることを確認します。<br>• ウィンドウレイアウトがデフォルトレイアウトであることを確認します。 | **a** デスクトップの［**Qualitative Analysis B.04.00**］アイコンをダブルクリックします。<br>**b**［データファイルを開く］ダイアログボックスで **sulfas_PosMS.d** を選択します。<br>**c**［**選択したメソッドでファイルを開くときにする処理を実行**］チェックボックスをオフにします。<br>**d** 必要に応じて［**結果データの読み込み**］チェックボックスをオフにします。<br>**e**［**開く**］をクリックします。<br>**f**［**コンフィグレーション**］>［**ワークフローのコンフィグレーション**］>［**一般**］コマンドをクリックします。<br>**g**［**ワークフローのデフォルトメソッドを読み込む**］ボタンと［**ワークフローのデフォルトレイアウトを読み込む**］ボタンをクリックします。<br>**h**［**OK**］ボタンをクリックします。<br>**i**［**コンフィグレーション**］>［**ユーザーインターフェイス コンフィグレーション**］をクリックします。<br>**j** すべてのチェックボックスをオンにして、すべてのオプションが使用できるようにします。<br>**k**［**OK**］ボタンをクリックします。 | • 一般ワークフローのデフォルトのレイアウトが自動的に読み込まれます。このデフォルトレイアウトに戻るには、［**コンフィグレーション**］>［**ウィンドウレイアウト**］>［**デフォルトレイアウトの復元**］をクリックします。このコマンドは常に、一般ワークフローに使用されるレイアウトに復元します。<br>• 前のタスクと同様に、メソッドに変更を加えると、変更された項目の横と［メソッドエクスプローラ］の変更されたセクションの横に青い三角形が表示されます。 |
| 2［クロマトグラムピークの同定］ウィザードを開始します。パラメータを変更して、前の結果を削除します。 | **a**［**ウィザード**］>［**クロマトグラムピークの同定**］コマンドをクリックします。<br>**b**［前回の結果］ページで、［**前の結果をすべて削除**］チェックボックスをオンにします。<br>**c**［**次へ**］ボタンをクリックします。 | • ウィザードは、一連のページを順にガイドします。各ページでタスクのパラメータを設定します。これらのページの多くは、［メソッドエディタ］ウィンドウのセクションおよびタブと重複しています。 |

タスク 1.［クロマトグラムピークの同定］ウィザードの実行

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|
| **3** ［クロマトグラム抽出］ページを編集します。パラメータを変更して､BPC およびシグナル A クロマトグラムを抽出します。 | **a** ［クロマトグラム抽出］ページで、**［BPC］**チェックボックスと**［シグナル A］**チェックボックスをオンにします。<br>**b** **［次へ］**ボタンをクリックします。 | • **［完了］**をクリックすると、現在のメソッドが変更されます。［メソッドエディタ］では、メソッドに保存されている値を変更すると青い三角形が表示されます。ただしウィザードの場合、メソッドの現在の値から変更されたウィザードの値が青い三角形で表示されます。 |

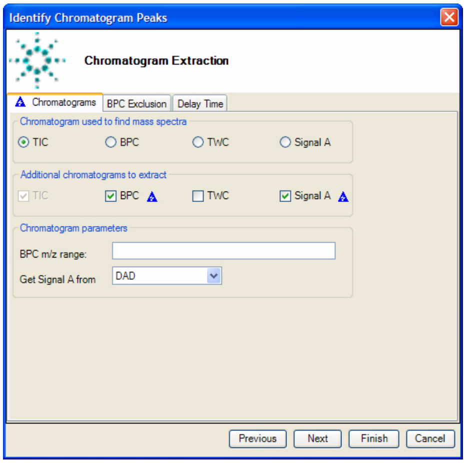



**図 100**［クロマトグラムピークの同定］ウィザードの［クロマトグラム抽出］ページ

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|
| **4** ［クロマトグラムの積分］ページを編集します。パラメータを変更して、大きい順に 4 つの MS ピークのみが積分されるようにします。 | **a** ［クロマトグラムの積分］ページで、**［ピーク（MS）］**タブをクリックします。<br>**b** **［ピーク数を高さベースで制限する］**チェックボックスをオンにし、4 と入力します。<br>**c** **［次へ］**ボタンをクリックします。 | • ウィザードはどのページからでも**［完了］**ボタンをクリックできます。ウィザード実行時には、メソッドの現在の値が使用されます。 |

## タスク 1.［クロマトグラムピークの同定］ウィザードの実行

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|

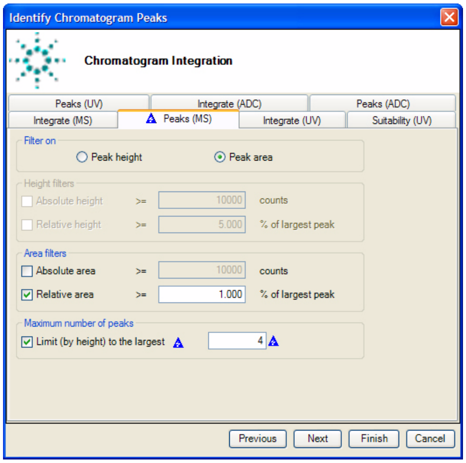



**図 101**［クロマトグラムピークの同定］ウィザードの［クロマトグラムの積分］ページ

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|
| **5**［抽出データフォーマット］ページのパラメータを確認します。 | **a**［抽出データフォーマット］ページで、パラメータを確認します。<br>**b**［**次へ**］ボタンをクリックします。 | • ウィザードの最後のページでは、［**次へ**］ボタンが灰色表示になります。ウィザードを完了させるか、前のページに戻ります。 |

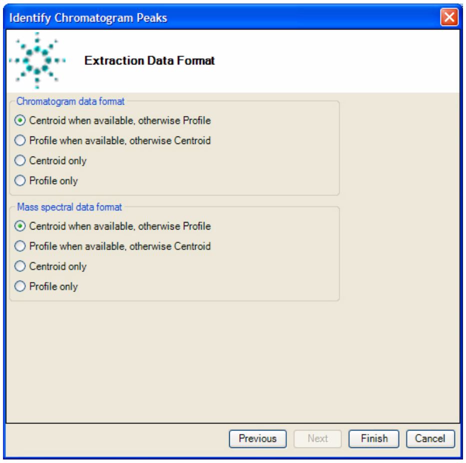



**図 102**［クロマトグラムピークの同定］ウィザードの［抽出データフォーマット］ページ

タスク 1.［クロマトグラムピークの同定］ウィザードの実行

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
| --- | --- | --- |
| 6 ［マススペクトルの抽出］ページを編集して、各ピークから減算するスペクトルをピーク開始点のスペクトルに変更します。 | a ［マススペクトルの抽出］ページで、MS ピークスペクトルバックグラウンドに **［ピーク開始点のスペクトル］** を選択します。<br>b **［次へ］** ボタンをクリックします。 | |

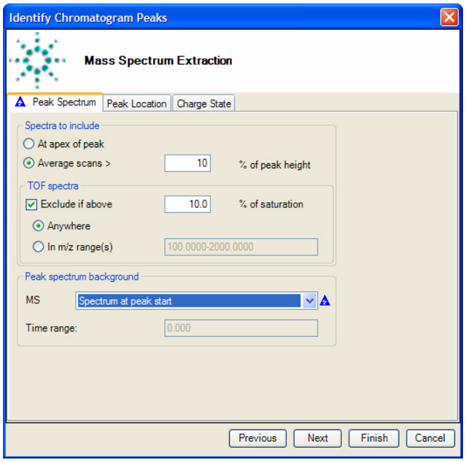



**図 103** ［クロマトグラムピークの同定］ウィザードの［マススペクトルの抽出］ページ

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
| --- | --- | --- |
| 7 ［スペクトルピーク同定］ページを編集します。パラメータを変更して、データベースを検索し、すべてのピークの化学式を作成します。 | a ［スペクトルピーク同定］ページで、**［ピークをデータベースで検索］** チェックボックスをオンにします。<br>b **［各ピークの化学式を作成］** チェックボックスをオンにします。<br>c **［すべてのピーク］** ボタンをクリックします。<br>d **［次へ］** ボタンをクリックします。 | |

## タスク 1.［クロマトグラムピークの同定］ウィザードの実行

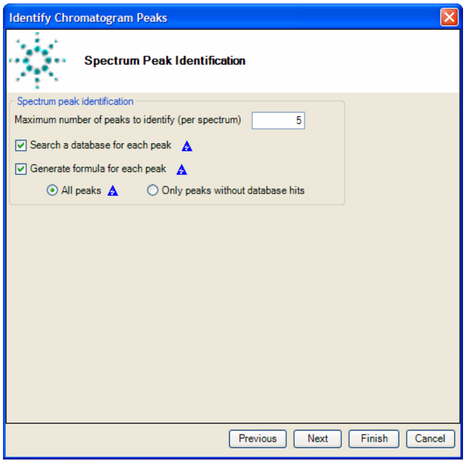



図 104［クロマトグラムピークの同定］ウィザードの［スペクトルピーク同定］ページ

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
| --- | --- | --- |
| **8**［データベース検索］ページのパラメータを確認します。 | **a**［データベース検索］ページで、パラメータを確認します。<br>**b**［次へ］ボタンをクリックします。 | |

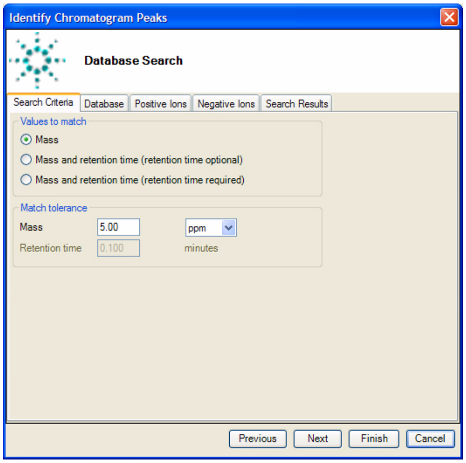



図 105［クロマトグラムピークの同定］ウィザードの［データベース検索］ページ

タスク 1.［クロマトグラムピークの同定］ウィザードの実行

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|
| **9**［分子式作成］ページを編集します。最小総合スコアを 25 に変更します。 | **a**［分子式作成］ページで、**［制限］**タブをクリックします。<br>**b** **［最小総合スコア］**チェックボックスをオンにします。<br>**c**［最小総合スコア］に **25** を入力します。<br>**d** **［次へ］**ボタンをクリックします。 | |

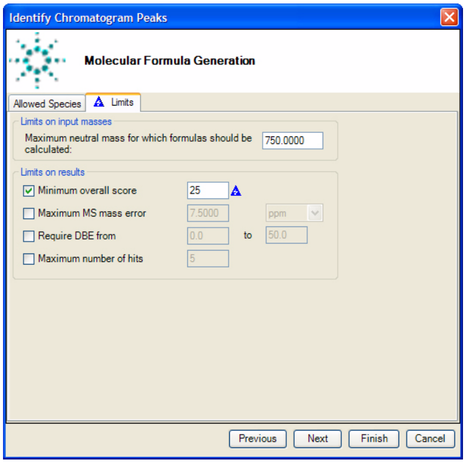



**図 106**［クロマトグラムピークの同定］ウィザードの［分子式作成］ページ

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|
| **10**［一致スコア］ページのパラメータを確認します。 | **a**［一致スコア］ページで、パラメータを確認します。<br>**b** **［完了］**ボタンをクリックします。 | |

タスク 1.［クロマトグラムピークの同定］ウィザードの実行

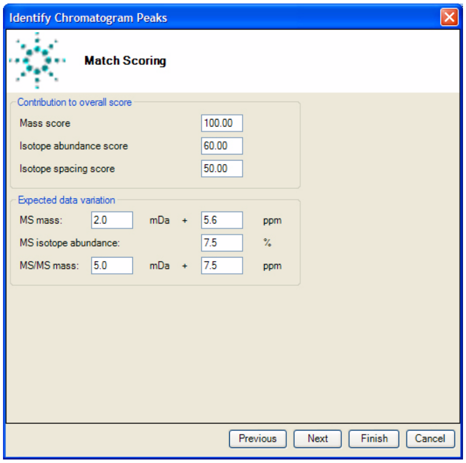



**図 107**［クロマトグラムピークの同定］ウィザードの［一致スコア］ページ

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|
| **11** 結果をレビューします。 | • まず、現在のメソッドに対しメソッド変更が適用されます。これらの変更は、ディスク上のメソッドに自動的には保存されません。<br>• 次に、クロマトグラムピーク調査処理が実行されます。 | • ウィザードの変更がディスク上の変更と異なる場合は、**[完了]** をクリックすると［メソッドエクスプローラ］ウィンドウセクションおよび［メソッドエディタ］ウィンドウに青い三角形が追加されます。 |
| **12** メソッドを *iii*exercise3 に保存し（ここで「*iii*」はユーザーのイニシャル）、結果を保存せずにデータファイルを閉じます。 | **a** トップメニューから **［メソッド］>［名前を付けて保存］** をクリックします。<br>**b** **iiiexercise3.m** と入力します。<br>**c** **［保存］** ボタンをクリックします。<br>**d** **［ファイル］>［データファイルを閉じる］** をクリックし、結果の保存を求められたら **［いいえ］** をクリックします。 | • メソッドを保存すると、メソッドで変更された値を示す青色三角形のすべてが消えることを確認します。 |

# タスク 2.［ターゲットの検出 : MFE + データベース検索］ウィザードの実行

このウィザードは、［**Molecular Feature** による検出］アルゴリズムと［データベース検索］アルゴリズムの実行前に変更するメソッドエディタのさまざまなセクションとタブをガイドします。

タスク 2.［ターゲットの検出 : MFE + データベース検索］の実行

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|
| 1 **sulfas_PosMS.d** を再び開きます。<br>• ファイルを開く際に、メソッドによってデータファイルの処理が実行されないことを確認します。<br>• メソッドが *iii*exercise1.m であることを確認します。 | a ［**コンフィグレーション**］>［**ワークフローのコンフィグレーション**］>［**一般**］コマンドをクリックします。<br>b ［**ワークフローのデフォルトメソッドを読み込む**］ボタンと［**ワークフローのデフォルトレイアウトを読み込む**］ボタンをクリックします。<br>c ［**OK**］をクリックします。<br>d ［**コンフィグレーション**］>［**ユーザーインターフェイス コンフィグレーション**］をクリックします。<br>e すべてのチェックボックスをオンにして、すべてのオプションが使用できるようにします。<br>f ［**OK**］ボタンをクリックします。<br>g ［**ファイル**］>［**データファイルを開く**］をクリックします。<br>h ［データファイルを開く］ダイアログボックスで **sulfas_PosMS.d** を選択します。<br>i ［**選択したメソッドでファイルを開くときにする処理を実行**］チェックボックスをオフにします。<br>j ［**開く**］をクリックします。<br>k ［**メソッド**］>［**開く**］をクリックして iiiexercise1.m メソッドを選択し［**開く**］をクリックします。 | • ［**結果データの読み込み**］チェックボックスがオフか灰色表示のどちらかになっていることを確認します。<br>• 異なるワークフローに切り替えると、新しいメソッドと新しいウィンドウレイアウトが読み込まれ、新しいセクションが［メソッドエクスプローラ］に追加されます。<br>• メソッドへの変更の保存を求められたら［**いいえ**］をクリックします。<br>• このウィザードは、他のワークフローを読み込んでいる時にも実行することができます。 |
| 2 ［**ターゲットの検出 : MFE + データベース検索**］ウィザードを開始します。低分子（クロマトグラフ）アルゴリズムを使用するよう、パラメータを変更します。 | a ［**ウィザード**］>［**ターゲットの検出 : MFE + データベース検索**］をクリックします。<br>b ［Molecular Feature による検出］ページで、［**ターゲットデータタイプ**］に［**低分子（クロマトグラフ）**］を選択します。<br>c ［**次へ**］ボタンをクリックします。 | • MFE アルゴリズムは、選択する［**ターゲットデータタイプ**］に応じて変更されます。 |

タスク 2.［ターゲットの検出 : MFE + データベース検索］の実行

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|

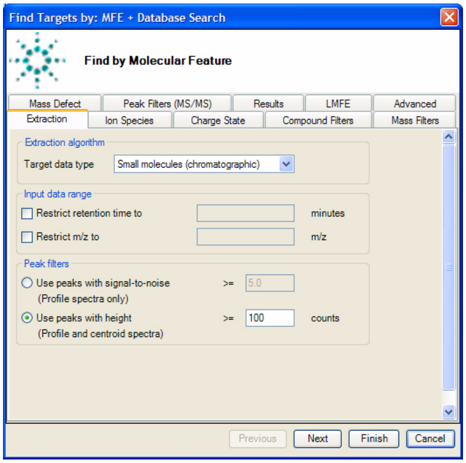



**図 108**［ターゲットの検出 : MFE + データベース検索］ウィザードの［Molecular Feature による検出］ページ

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|
| **3**［質量リストによるフィルタ］ページを編集します。最小総合スコアを 25 に変更します。 | **a**［質量リストによるフィルタ］ページで、**［質量リストでフィルタする］**チェックボックスをオンにします。<br>**b** **［リストの質量のみを含める］**を選択します。<br>**c** **［質量］**ボタンをクリックします。<br>**d** 271.0800, 285.0200, 279.0900, 311.0800 を入力します。<br>**e** **［次へ］**ボタンをクリックします。 | • このウィザードページは、前のウィザードページにタブの 1 つとして含まれています。このタスクでは、質量リストによるフィルタが非常に重要です。<br>• 質量リストの代わりに、データベース例の *default.csv* を選択することもできます。 |

タスク 2.［ターゲットの検出 : MFE + データベース検索］の実行

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|

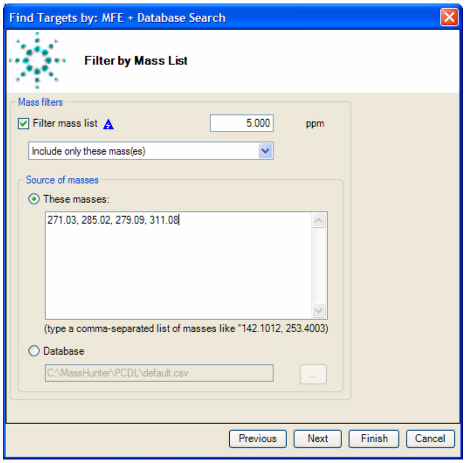



図 109［ターゲットの検出 : MFE + データベース検索］ウィザードの［質量リストによるフィルタ］ページ

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|
| 4 ［データベース検索］ページのパラメータを確認します。 | a パラメータを確認します。<br>b ［次へ］ボタンをクリックします。 | |

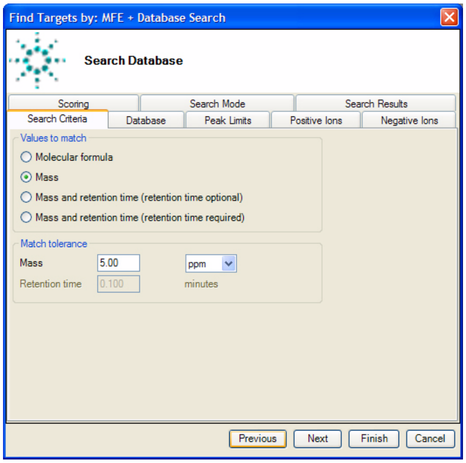



図 110［ターゲットの検出 : MFE + データベース検索］ウィザードの［データベース検索］ページ

タスク 2.［ターゲットの検出 : MFE + データベース検索］の実行

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|
| **5**［化学式の作成］ページを編集します。最小総合スコアを 25 に変更します。 | **a**［**制限**］タブをクリックします。<br>**b**［最小総合スコア］に 25 を入力します。<br>**c**［**完了**］ボタンをクリックします。 | |

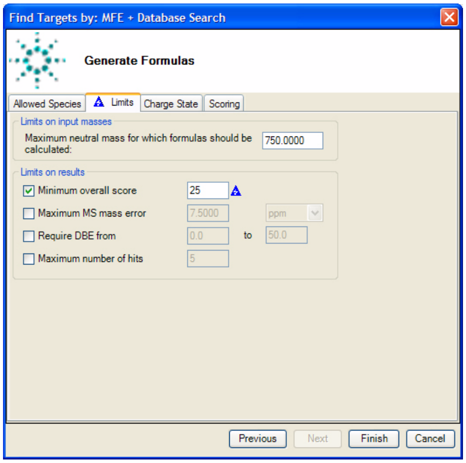



**図 111**［ターゲットの検出 : MFE + データベース検索］ウィザードの［化学式の作成］ページ

| | | |
|---|---|---|
| **6** 定性分析プログラムの結果をレビューします。 | • レポートは作成されません。<br>•［化合物リスト］ウィンドウおよび［化合物同定結果］ウィンドウを使用して結果をレビューしてください。 | |
| **7** メソッドを *iii*exercise4 に保存します。ここで、「*iii*」はユーザーのイニシャルです。 | **a** メニューから［**メソッド**］>［**名前を付けて保存**］をクリックします。<br>**b** **iiiexercise4.m** と入力します。<br>**c**［**保存**］をクリックします。 | • メソッドを保存すると、メソッドで変更された値を示す青色三角形のすべてが消えることを確認します。 |
| **8** 結果を保存せずに、データファイルを閉じます。 | **a**［**ファイル**］>［**データファイルを閉じる**］をクリックします。<br>**b** 結果の保存を求められたら、［**いいえ**］をクリックします。 | |

# リファレンス

ウィンドウの操作 164
データナビゲータ における結果データの操作 166
クロマトグラムの操作を行う 167
MS または MS/MS スペクトルで操作を行う 168
クロマトグラフ表示データの操作 169
スペクトル表示データの操作 170
ワークフロー 171
レポートテンプレートのカスタマイズ 174

# ウィンドウの操作

定性分析プログラムを初めて開くと、デフォルトレイアウトとして 3 つのウィンドウ、［データナビゲータ］、［メソッドエクスプローラ］、［クロマトグラム結果］が表示されます。［表示］メニューを用いて、以下にリストしたその他 17 のウィンドウを表示することが可能です。

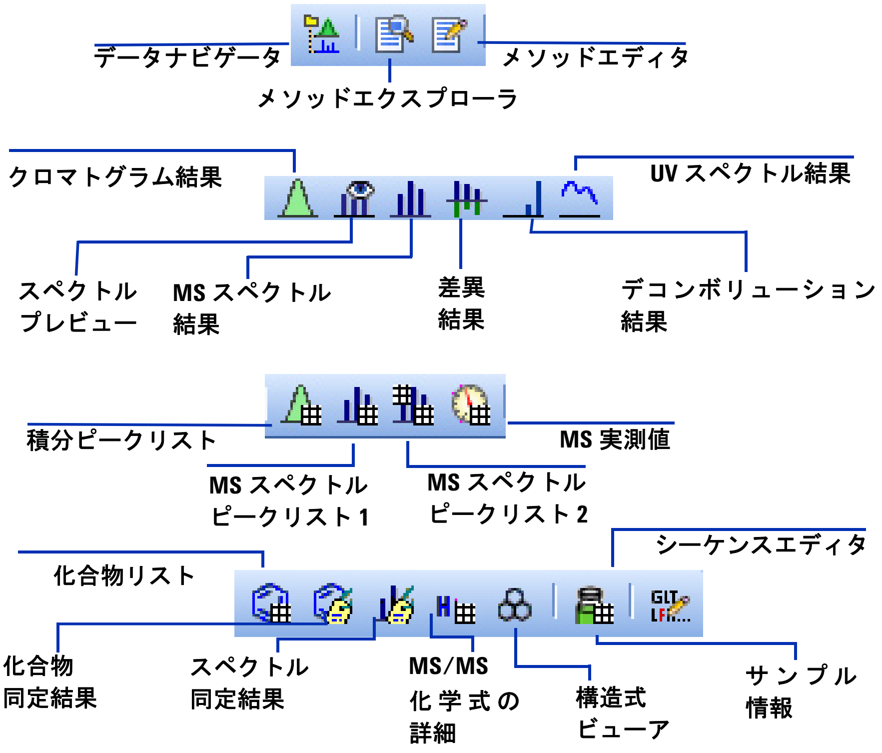
- メソッドエディタ - さまざまなタブを含む、メソッドパラメータの編集ウィンドウです
- スペクトルプレビュー - データファイルのスペクトルを迅速に確認できます
- MS スペクトル結果 - MS および MS/MS スペクトルを表示します
- 結果の差 - ライブラリ検索後の結果の差を表示します
- デコンボリューション結果 - デコンボリュートスペクトルを表示します
- UV スペクトル結果 - UV スペクトルを表示します
- 積分ピークリスト - テーブルに積分結果を表示します
- MS スペクトルピークリスト 1 - 選択された最初のスペクトルのピークテーブルを表示します
- MS スペクトルピークリスト 2 - 選択された 2 番目のスペクトルのピークテーブルを表示します
- MS 実測値 - ハイライトされたスペクトルの測定情報を表示します
- 化合物リスト - ［化合物の検出］アルゴリズムの 1 つを使用して検出した化合物を表示します
- 化合物同定結果 - 選択された化合物の同定情報を表示します
- スペクトル同定結果 - 選択されたスペクトルの同定情報を表示します
- MS/MS 化学式の詳細 - MS/MS スペクトルに表示されたフラグメントについて計算された化学式の候補をテーブル表示します
- 構造式ビューア - 現在の化合物またはスペクトルに関連する構造式を表示します
- サンプル情報 - ハイライトしたデータファイルに関する情報を表示します
- シーケンスエディタ - メソッドシーケンスの編集ウィンドウです

関連ツールを開始すると次の 3 つのツールウィンドウも表示されます。

- 化学式計算ツール
- 質量計算ツール
- 再キャリブレーション

## メインツールバーのウィンドウアイコン

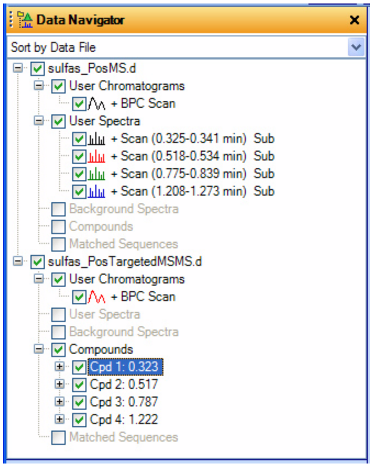
メインツールバーの以下のアイコンを用いて、ウィンドウの表示 / 非表示を切り替えることができます。MassHunter BioConfirm ソフトウェアがインストールされている場合は、使用できるアイコンが追加されます。［表示］メニューのコマンドを使用してこれらのウィンドウを開くこともできます。



# データナビゲータ における結果データの操作

## [データナビゲータ] ウィンドウとツール

[データナビゲータ] では、データファイルまたはデータタイプを使用して、抽出やスペクトルなどの結果すべてを並べ替えることができます。



### [リンクナビゲーション] アイコン

有効な場合 (デフォルト)、[データナビゲータ] のクロマトグラムをハイライトすると、対応するスペクトルもハイライトされます。対応するクロマトグラムとスペクトルグラフィック結果もハイライトされます。 [リンクナビゲーション] は、[クロマトグラム] メニューの [ピークスペクトルの積分と抽出] メニューを使用した場合か、[化合物] アルゴリズムのいずれかを実行した場合に限り機能します。

### チェックマークツール

**シングルチェックマーク** - ハイライトしたデータすべてのチェックボックスをオンにします。.

**ダブルチェックマーク、1 つ灰色** - ハイライトしたデータのチェックボックスをオンにして、その他のチェックボックスの選択を解除します。

**ダブルチェックマーク** - すべてのチェックボックスをオンにします。

チェックボックスがオンの場合のみ、クロマトグラムとスペクトルが表示されます。

# クロマトグラムの操作を行う

メニュー項目を用いて、クロマトグラム全体、あるいはクロマトグラムの選択範囲で、以下の操作を行えます。

| 処理 | メニュー項目 |
|---|---|
| クロマトグラムの抽出 | ［クロマトグラム］ > ［クロマトグラムの抽出］ |
| 定義済みクロマトグラムの抽出 | ［クロマトグラム］ > ［定義済みクロマトグラムの抽出］ |
| クロマトグラムの積分 | ［クロマトグラム］ > ［クロマトグラムの積分］ |
| ピークスペクトルの積分と抽出 | ［クロマトグラム］ > ［ピークスペクトルの積分と抽出］ |
| クロマトグラムのスムージング | ［クロマトグラム］ > ［クロマトグラムのスムージング］ |
| S/N 比の計算 | ［クロマトグラム］ > ［S/N 比の計算］ |
| クロマトグラムの減算 | ［クロマトグラム］ > ［クロマトグラムの減算］ |
| 自動 MS/MS データからの化合物の検出 | ［検出］ > ［自動 MS/MS による化合物の検出］ |
| ターゲット MS/MS データからの化合物の検出 | ［検出］>［ターゲット MS/MS による化合物の検出］ |
| MS（1）データの化合物の検出 | ［検出］ > ［Molecular Feature による化合物の検出］ |
| MRM データの化合物を検出 | ［検索］ > ［MRM による化合物の検出］ |
| クロマトグラムデコンボリューションによる化合物の検出 | ［検出］ > ［クロマトグラム デコンボリューションによる化合物の検出］ |
| 特定化学式に一致する化合物の検出 | ［検出］ > ［化学式による化合物の検出］ |

## 選択範囲に対するショートカットメニュー

クロマトグラフ範囲を選択した場合、上記に記載されている操作と記載されていないその他の操作に加えて、スペクトルを抽出することや、バックグラウンドにスペクトルを抽出することもできます。

1 これらの操作は、［クロマトグラム結果］ツールバーの［範囲選択］ツール（ ）をクリックして実行します。

2 範囲の開始点をクリックし、範囲をドラッグして、マウスボタンを離します。
3 クロマトグラム内を右クリックし、ショートカットメニューから操作をクリックします。

### データファイルに結果を保存します。

- ［保存］アイコン（ ）をクリックするか、［ファイル］ > ［結果の保存］をクリックします。

  プログラムを終了する際に、結果をデータファイルに保存するか問われます（この機能は、［メッセージボックスオプション］ダイアログボックスからオフに設定できます）。

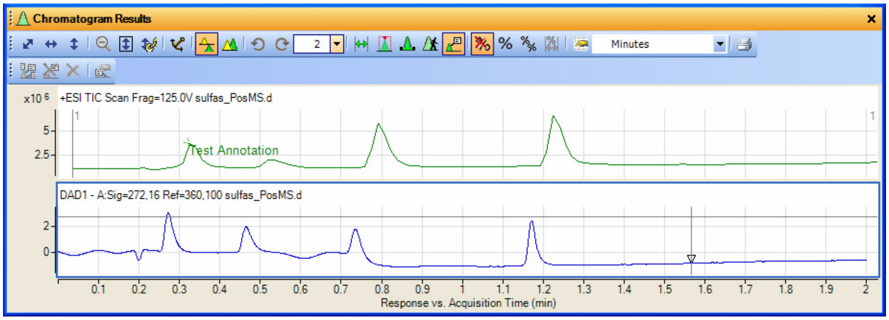
## MS または MS/MS スペクトルで操作を行う

メニュー項目を用いて、MS または MS/MS スペクトル、あるいはそれらのスペクトルの選択範囲で以下の操作を行うことができます。

| 処理 | メニュー項目 |
|---|---|
| スペクトルのピークに関する m/z、アバンダンス、電荷の状態、その他の情報の表示 | ［表示］ > ［MS スペクトルピークリスト 1］ |
| バックグラウンドスペクトルの減算 | ［スペクトル］ > ［バックグラウンドスペクトルの減算］ |
| スペクトルの減算 | ［スペクトル］ > ［スペクトルの減算］（メニュー項目を選択後、別のスペクトルをクリック） |
| 2 つのスペクトルをひとつにする | ［スペクトル］ > ［任意のスペクトルの加算］（メニュー項目を選択後、別のスペクトルをクリック） |
| スペクトルの特定質量に一致するエントリをデータベースで検索 | ［スペクトル］ > ［データベースでスペクトルピークを検索］ |
| スペクトルの選択範囲の質量から化学式を作成 | ［スペクトル］ > ［スペクトルピークから化学式を作成］（MS スペクトルで範囲が選択されている場合） |
| 同位体分離アルゴリズムを使用してデコンボリュート | ［スペクトル］>［デコンボリュート ( 同位体分離 )］ |
| ライブラリの検索 | ［同定］>［ライブラリでスペクトルを検索］または［スペクトル］>［ライブラリでスペクトルを検索］ |

# クロマトグラフ表示データの操作

## ［クロマトグラム結果］ウィンドウ




## クロマトグラム結果ツール

### ズームツールアイコン

**X 軸と Y 軸のオートスケール**

**X 軸のオートスケール**

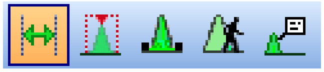
**Y 軸のオートスケール**

**ズーム解除**

**ズーム中に Y 軸をオートスケール**

**Y 軸リンクモード**

### 選択ツールアイコン



**範囲選択** - オンにして、処理を実行したいクロマトグラムの範囲を選択します

**ピーク選択** - オンにすると、積分ピークのスペクトルの頂点が選択されるようになります

**マニュアル積分** - オンにすると、マウスを使用してマニュアル積分ができます

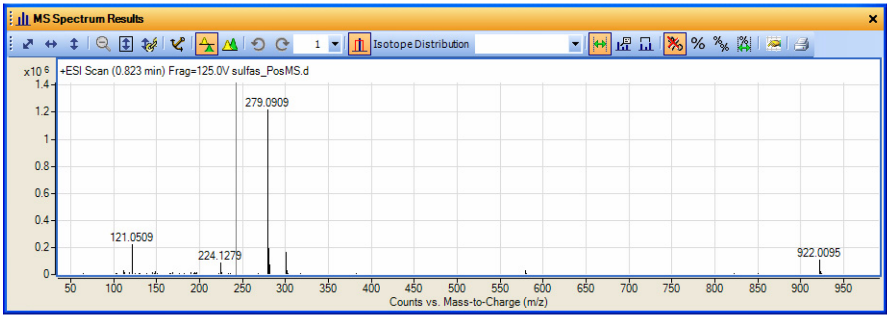
**クロマトグラムを進める** - オンにすると、各ポイントをクリックするか、キーボードの左右矢印キーを用いて、個々のスペクトルを確認できます

**注釈** – オンにして、クロマトグラムにイメージやテキスト注釈を追加します

ツールの選択を解除するには、別のツールまたはアイコンをクリックします。

# スペクトル表示データの操作

## ［MS スペクトル結果］ウィンドウ




## MS スペクトル結果ツール

ズームツール
アイコン

X 軸と Y 軸のオートスケール

X 軸のオートスケール

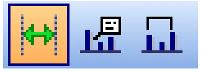
Y 軸のオートスケール

ズーム解除

ズーム中に Y 軸をオートスケール

Y 軸リンクモード

選択ツールアイコン



ツールの選択を解除するには、別のツールまたはアイコンをクリックします。

**範囲選択** - オンにして、処理を実行したいクロマトグラムの範囲を選択します

**注釈** – オンにして、クロマトグラムにイメージやテキスト注釈を追加します

**質量差** – オンにして、選択したスペクトルに質量差を追加します。［デコンボリューション結果］ウィンドウでは、［アミノ酸］質量差または［修飾］質量差を追加することもできます。

# ワークフロー

ワークフローは、用途に応じてユーザーインターフェイスをカスタマイズするのに役立ちます。各ワークフローは、そのワークフローに適切なパラメータを持つ異なるメソッドを読み込みます。また、各ワークフローは異なるレイアウトを読み込みます。このレイアウトでは各テーブルに表示される列もカスタマイズしています。最後に、レイアウトのうちの 4 つには、特別なメソッドエディタのセクションが追加されており、各ワークフローに重要なメソッドエディタのセクションがコピーされています。特殊なワークフローで使用する機能をまとめてグループ化すると、メソッドのカスタマイズに便利です。

定性分析プログラムでは、次の複数のワークフローが使用できます。

- 一般
- BioConfirm - これらのワークフローは、BioConfirm ソフトウェアがインストールされ、[ユーザーインターフェイス コンフィグレーション] ダイアログボックスでオンになっている場合に限り使用できます。BioConfirm には､実行する分析のタイプに応じた複数のワークフローが準備されています。
- クロマトグラムピーク調査
- 化学式の確認とサンプル純度
- MS ターゲット化合物のスクリーニング

GC/MSデータの作業で使用できるのは一般ワークフローのみです。LC/MSデータの作業には、どのワークフローでも選択できます。

## 特有のメソッド

各ワークフローは、そのワークフローにより適切な設定のある特定のデフォルトメソッドを読み込みます。たとえば、BioConfirm ワークフローの 1 つに切り替えると、[Molecular Feature による化合物の検出] アルゴリズムの **[ターゲットデータタイプ]** が **[高分子(タンパク質、オリゴ核酸)]** に設定されます。この設定は BioConfirm ワークフローには適していますが、デフォルトでは他のワークフローには適していません。

## 特有のレイアウト

各ワークフローでは、特有のレイアウトが読み込まれます。レイアウトは以下のもので構成されています。

- 各ウィンドウの位置とサイズ
- タブ付けされているウィンドウの指定

- フローティングウィンドウの指定
- タブ付けされているウィンドウのうちどのウィンドウを一番上に表示するか
- デフォルトで表示されるウィンドウの指定
- ステータスバーを表示するかどうか

各プロットウィンドウ（[クロマトグラム結果]、[スペクトルプレビュー]、[MS スペクトル結果]、[デコンボリューション]、[UV スペクトル結果］ウィンドウ）については以下が指定されています。

- グラフィックが重ね書きされるかどうか
- ［ズーム中に Y 軸をオートスケール］モードがオンかどうか
- ［Y 軸リンクモード］がオンかどうか

各テーブルウィンドウについては以下が指定されています。

- 表示する列の指定
- 列の順番
- 各列の幅
- テーブルに追加されたフィルタ（[化合物リスト］テーブル、[化合物同定結果］テーブル、[スペクトル同定結果］ウィンドウでのみ使用可能)。

## ［メソッドエクスプローラ］と［メソッドエディタ］の特有のセクション

一般ワークフローで［メソッドエディタ］を使用すると、そのメソッドのほとんどすべてのパラメータが変更できます。

その他の 4 つのワークフローではそれぞれ［メソッドエクスプローラ］で使用できるセクションが変更されています。それらのセクションには、そのワークフローに役立つ［メソッドエディタ］のタブとセクションのみが含まれています。ワークフローセクションのパラメータを変更すると、一般ワークフローのメソッドエディタセクションの該当するセクションのパラメータも自動的に変更されます。

一般ワークフローの［メソッドエディタ］セクションには、存在しないタブもあります。**［クロマトグラムピーク調査ワークフロー］>［スペクトルピーク同定］**セクションおよび**［クロマトグラムピーク調査ワークフロー］>［クロマトグラム抽出］>［クロマトグラム］**タブは、［クロマトグラムピーク調査ワークフロー］のみに含まれます。これらのセクションは、［クロマトグラムピーク調査］アルゴリズムのみに影響します。このアルゴリズムはこのワークフローと**［クロマトグラムピーク調査（解析レポートなし）］**処理および**［クロマトグラムピーク調査（解析レポートを作成する）］**処理のみで使用されています。

## ワークフローのメソッドとレイアウト

各ワークフローで指定されているデフォルトのメソッドとレイアウトは次のとおりです。

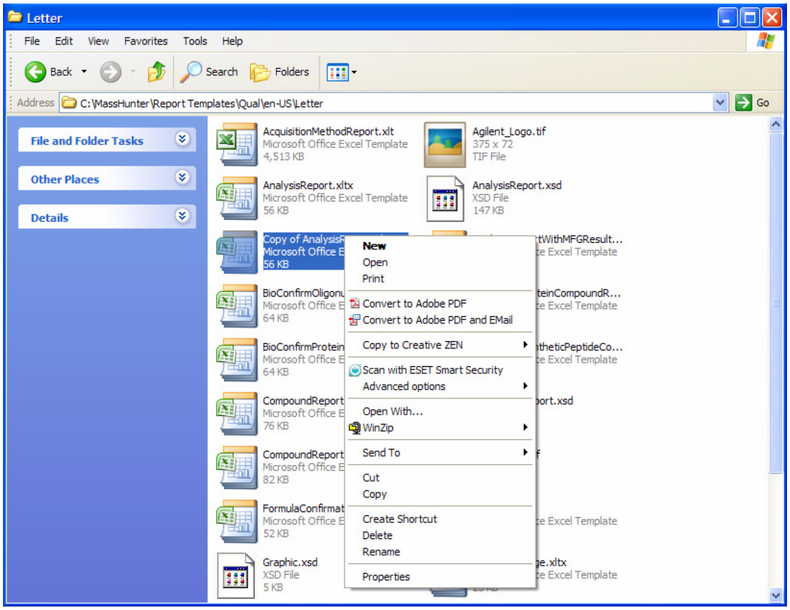
| ワークフロー | メソッド | レイアウト | メソッドエクスプローラセクション |
|---|---|---|---|
| 一般 | default.m | Default.xml | なし |
| BioConfirm 未消化タンパク質 | BioConfirm IntactProtein-Default.m | BioConfirm-IntactProtein-MaximumEntropy-Default.xml | BioConfirm ワークフロー |
| BioConfirm 高質量未消化タンパク質 | BioConfirm IntactProtein HighMass Default.m | BioConfirm IntactProtein LMFE.xml | BioConfirm ワークフロー |
| BioConfirm 短鎖オリゴ核酸 | BioConfirmOligo nucleotideSmall.m | BioConfirmOligo-nucleotide.xml | BioConfirm ワークフロー |
| BioConfirm 長鎖オリゴ核酸 | BioConfirmOligo nucleotideLarge-Default.m | BioConfirmOligo-nucleotide.xml | BioConfirm ワークフロー |
| BioConfirm タンパク質消化物 | BioConfirmProtein Digest-Default.m | BioConfirm ProteinDigest.xml | BioConfirm ワークフロー |
| BioConfirm 合成ペプチド | BioConfirmSynthetic Peptide-Default.m | BioConfirm SyntheticPeptide.xml | BioConfirm ワークフロー |
| クロマトグラムピーク調査 | ChromPeakSurvey-Default.m | Default.xml | クロマトグラムピーク調査ワークフロー |
| MS ターゲット化合物のスクリーニング | Screening-Default.m | Screening-Default.xml | MS ターゲット化合物スクリーニングワークフロー |
| 化学式の確認とサンプル純度 | SamplePurity-Default.m | SamplePurity-Default.xml | 化学式の確認とサンプル純度ワークフロー |

# レポートテンプレートのカスタマイズ

レポートテンプレートの変更方法の詳細については、MassHunter Report Designer アドインのオンラインヘルプ、『Report Designer Familiarization Guide』、または「Reporting Training DVD」を参照してください。次のステップでは、テンプレートのカスタマイズの概要を示します。

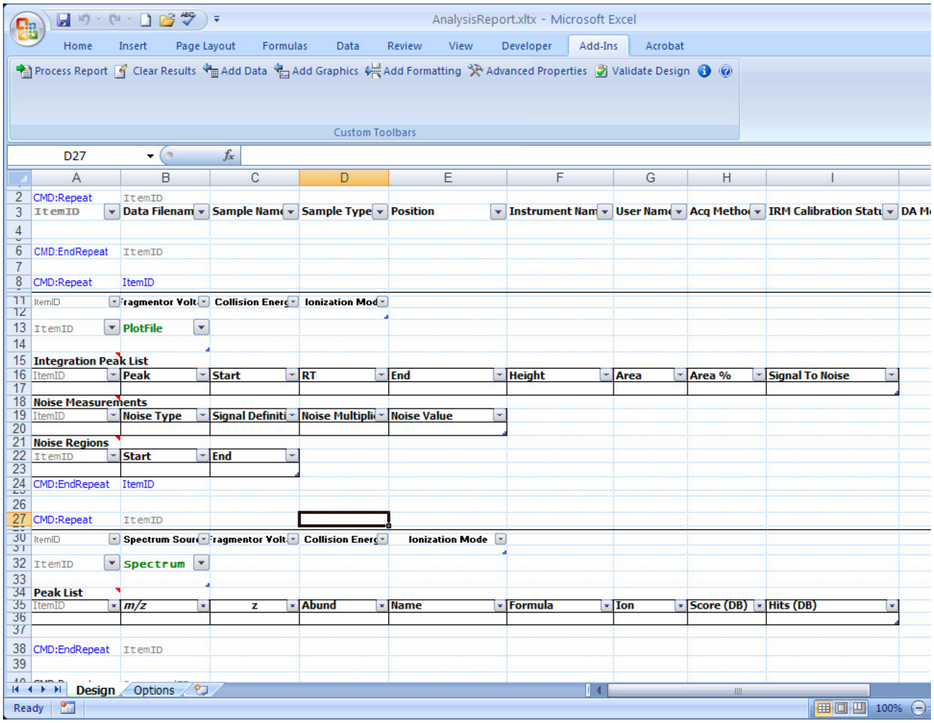
**1** レポートテンプレートのフォルダに移動します。デフォルトでは、次のフォルダです。
**\MassHunter\Report Templates\Qual\B.04.00\ja\A4** ［メソッドエクスプローラ］の［レポート］>［共通レポートオプション］>［テンプレート］タブから異なるフォルダを選択することができます。

**2** 変更するテンプレートのコピーを作成します。 コピーを右クリックし、**［プロパティ］**をクリックします。 **［読み取り専用］**チェックボックスをオフにします。コピーを右クリックし、ショートカットメニューから**［開く］**をクリックします。




テンプレートをこの方法で開くと、Excel はこのファイルがテンプレートファイルであることを認識します。テンプレートを開いて、ヘッダーとフッターの変更、パラメータ列の追加、削除、移動を行います。詳細は、オンラインヘルプを参照してください。すべての定性分析テンプレートは、読み取り専用にされています。テンプレートの編集前にこのプロパティを変更しておいてください。

定性分析プログラムには多数のテンプレートがインストールされています。各レポートテンプレートの内容の詳細については、定性分析のオンラインヘルプを参照してください。




**3** 必要な変更を加えます。

テンプレートの変更方法の詳細については、MassHunter Report Designer アドインのオンラインヘルプ、または「*Agilent MassHunter Reporting - Training DVD*」を参照してください。

**4** 新しいテンプレートを保存するには、［Microsoft Office］ボタンから［保存］をクリックするか、［名前を付けて保存］ > （［その他の形式］）をクリックします。

**5** 任意の名前を入力し、［保存］をクリックします。

**www.agilent.com**

## 本書の内容

このガイドには、Agilent MassHunter ワークステーション ソフトウェア – 定性分析 の使い方を学習するための情報が含まれています。

©Agilent Technologies, Inc. 2011

リビジョン B、2011 年 2 月

*G3336-96007*

G3336-96007

Agilent Technologies